作业第十九题报告

PB18020539 黄韫飞

1.作业题目：用Numerov法求解一维定态薛定谔方程在一个对称势阱（势能函数$V(x)$可任意设置）中的基态和激发态的能量本征值，画出能量本征值及其附近的波函数

2.算法与公式：

薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$
$$\Rightarrow \psi''(x)=-\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)$$

Numerov法要求方程具有的形式为：$\psi''(x)=f(x)\psi(x)$，在本题中，$f(x)=-\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]$，

根据泰勒展开：

$$\psi_{n+1}=2\psi_n-\psi_{n-1}+h^2\psi_n''+\frac{1}{12}h^4\psi_n^{(4)}+O(h^6)$$

令$\psi_n''=F_n=f_n\psi_n$，并根据$F_n''=\frac{F_{n+1}-2F_n+F_{n-1}}{h^2}$，有：

$$\left(1-\frac{h^2f_{n+1}}{12}\right)\psi_{n+1}=2\left(1-\frac{h^2f_n}{12}\right)\psi_n-\left(1-\frac{h^2f_{n-1}}{12}\right)\psi_{n-1}+h^2f_n\psi_n$$

令$y(x)=\left(1-\frac{h^2f(x)}{12}\right)\psi(x)$，得到：

$$y_{n+1}=2y_n-y_{n-1}+h^2f_n\psi_n$$

用这一算法求解一维无限深对称方势阱$V(x)$中的波函数与能量本征值：

$$V(x)=\begin{cases}0 & 0\le x\le 1\\ \infty & else\end{cases}$$

令$\frac{\hbar^2}{2m}=1$，所以$f(x)=-E$，$y(x)=(1+\frac{h^2E}{12})$，递推式：

$$\psi_{n+1}=\frac{2(1-\frac{5h^2E}{12})\psi_n-(1+\frac{h^2E}{12})\psi_{n-1}}{1+\frac{h^2E}{12}}$$

根据该方程的解析解：$\psi_n(x)=\sqrt{2}\sin(n\pi x)$，$E_n=n^2\pi^2$

计算过程中，首先取一个E并设置波函数的误差容限tol，设$\psi_0=0,\psi_1=\sqrt{2}\sin\sqrt{E}h$，由递推式求出$\psi_0,\dots,\psi_n$，真正的能量本征值应使得$\psi_E(x=1)=0$，用二分法算出$\psi(x=1)=0$时的E作为能量本征值

3.计算结果与讨论：

取得参数为：

节点数$N=1E5$，即步长$h=1e-5$，二分法计算E得误差容限为$tolE=1e-5$

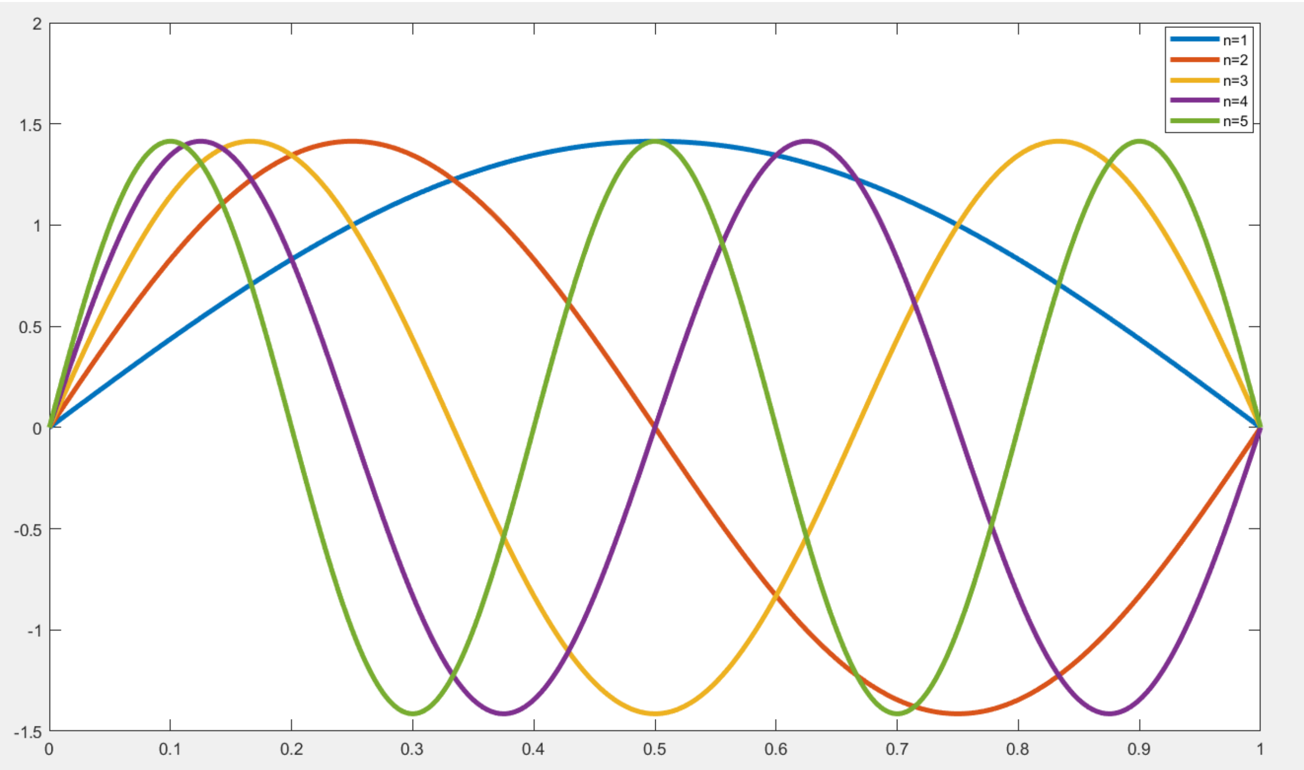
计算得到E的前5个本征值为

n	**E**	$n^2\pi^2$

n	**E**	$n^2\pi^2$
1	9.869604	9.869604
2	39.478426	39.478418
3	88.826437	88.826440
4	157.913675	157.913670
5	246.740103	246.740110

可以看到E的数值解和理论解$n^2\pi^2$之间的差别在10^{-6}量级，这是因为取的$tolE = 1e-5$

画出$n = 1, 2, 3, 4, 5$的波函数



与理论结果$\psi_n = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$符合的很好。

4.结论

本次作业采用了Numerov迭代的方式，解得一维定态薛定谔方程得波函数，得到了一维无限深方势阱的前5个能量本征值分别为E=9.869604，39.478426，88.826437，157.913675，246.740103，与理论值$E = n^2\pi^2$差别不大。解能量本征值时采用的二分法使得我可以控制能量本征值的计算精度。得到的波函数的特点与$\sqrt{2}\sin n\pi x$相符合，但是具体的误差以及Numerov方法的阶数在本题中未作讨论，相信如果取不同的n值计算迭代过程中的局部截断误差，可以得到该方法的阶数。