第四次作业

陈硕航

2021 年 11 月 2 日

1 用一位无限深势井的波函数的线性组合去近似谐振子

1.1 代码实现

代码参见“第四次作业计算.py”以及“第四次作业计算 Ver2.py”

1.2 结果展示

输出得到的前 20 个本征能量结果如下：

```
[ 0.159075   0.477226   0.795377   1.113528   1.431679
  1.749830   2.067981   2.386131   2.704282   3.022433
  3.340584   3.658735   3.976886   4.295036   4.613187
  4.931338   5.249489   5.567640   5.885791   6.203942 ]
```

输出的本征能量满足 $E_1 : E_2 : \cdots : E_n = 1 : 3 : \cdots : (2n-1)$，符合物理课本中谐振子本征能级的比例。前 20 个本征能级对应的波函数图像如下所示：

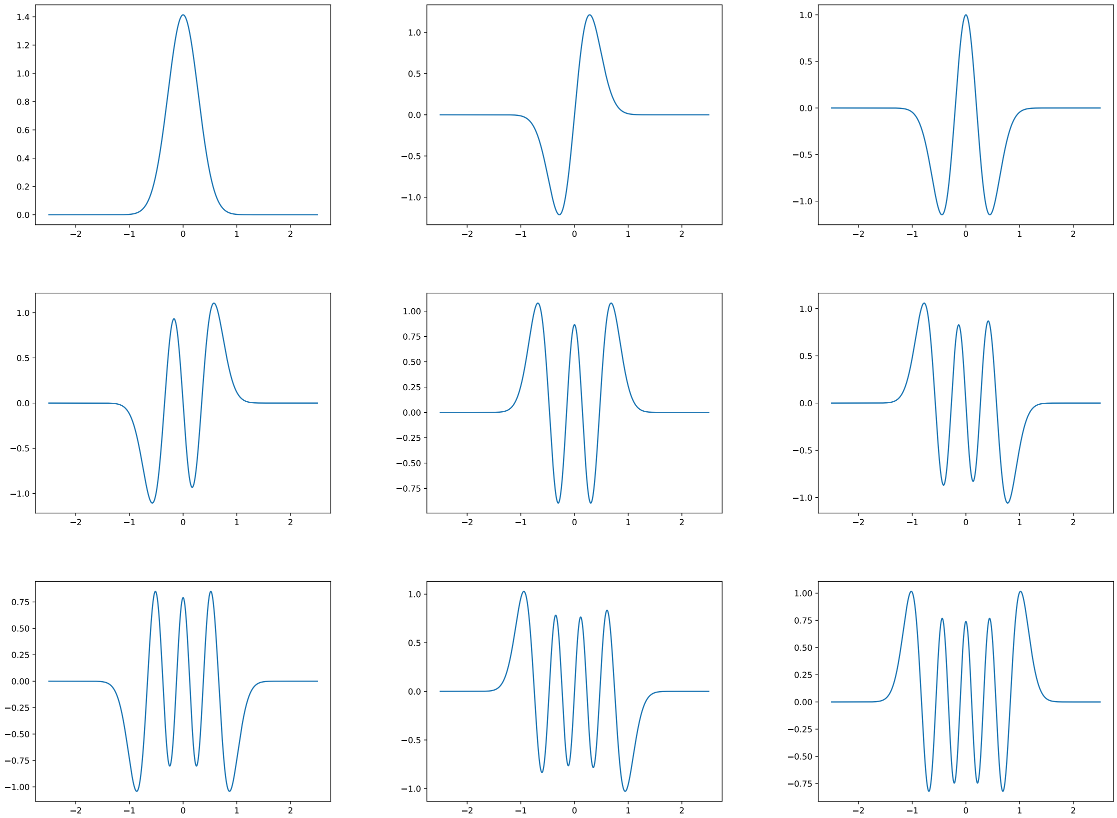

图 1: 谐振子对应量子数 $n = 1, 2, ..., 9$ 的波函数

1.3 关于步长的选择

步长选择只需要满足波函数归一化的性质即可。取 $N = 1001$ 的时候，波函数 ϕ_1 归一化得到的结果为0.999001，说明误差在 0.1% 左右。取 $N = 10001$ 乃至 $N = 100001$ 虽然更加精确，归一化得到的结果为0.999900以及0.999990但是计算耗费时间更长（$N = 1001$ 总计算时间为 10.771s，$N = 10001$ 总计算时间为 40.734s，$N = 100001$ 计算时间为 383.023s），故此处只取 $N = 1001$。

附 $N = 10001$ 的时候计算得到的前 20 个能量本征态如下：

```
[ 0.159147  0.477441  0.795735  1.114029  1.432323
  1.750617  2.068911  2.387205  2.705499  3.023793
  3.342087  3.660381  3.978675  4.296969  4.615263
  4.933557  5.251851  5.570145  5.888438  6.206732 ]
```

$N = 100001$ 的时候计算得到的前 20 个能量本征态如下：

```
[ 0.159154  0.477462  0.795771  1.114079  1.432387
  1.750696  2.069004  2.387312  2.705621  3.023929
```

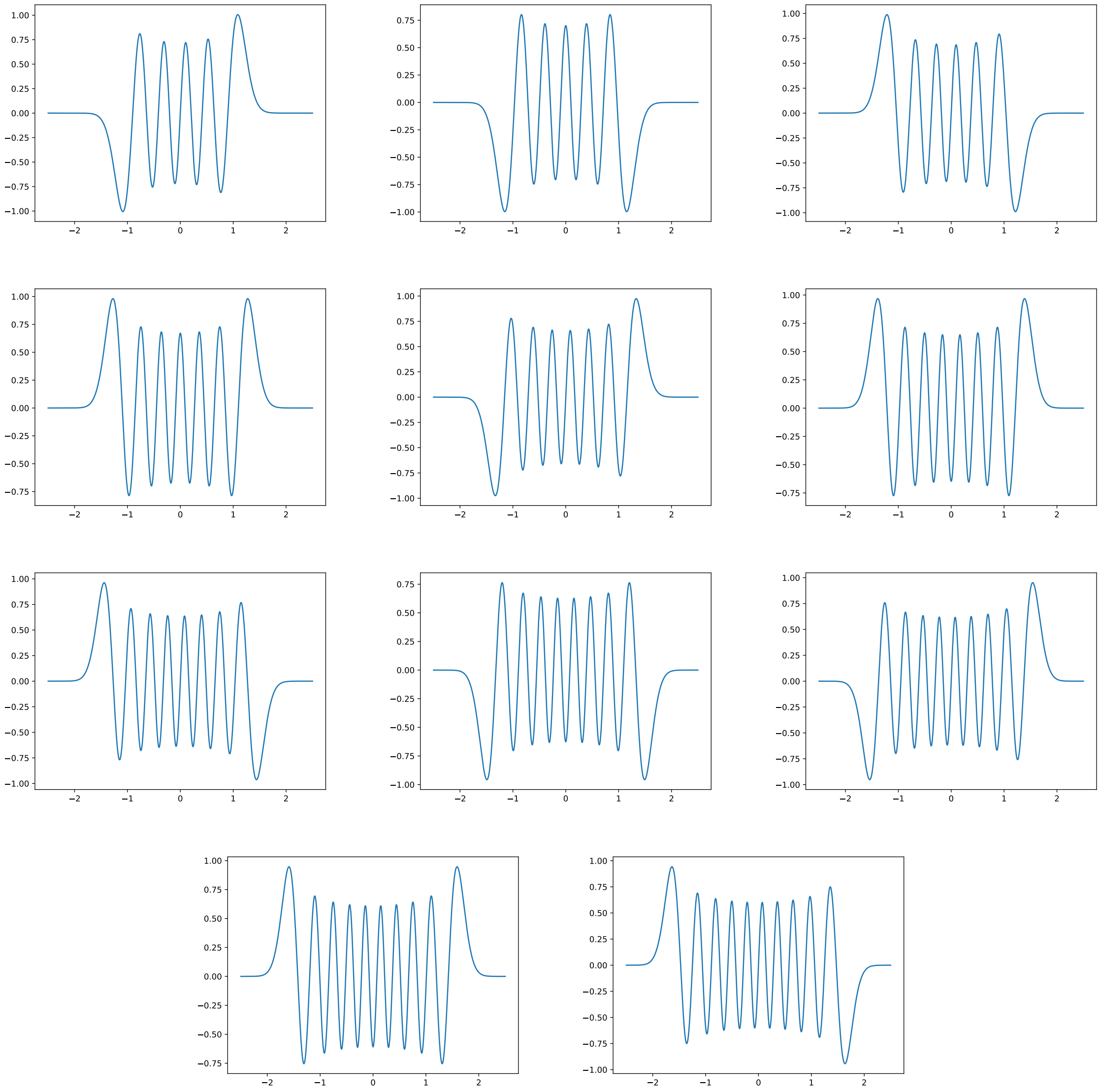

图 2: 谐振子对应量子数 $n = 10, 11, ..., 20$ 的波函数

```
    3.342237   3.660545   3.978854   4.297162   4.615470
    4.933779   5.252087   5.570395   5.888703   6.207012  ]
```

1.4 关于基组个数的选择

考虑到应当选取的本征能量为前 20 个，因此选取的基组个数至少应当为 40 个左右。$M = 40$ 的时候计算得到的前 20 个本征能量如下：

```
[  0.182228   0.605406   1.244401   2.009672   3.176784
   4.304451   6.064712   7.513455   9.913872  11.638677
  14.725080  16.680558  20.498633  22.639318  27.234742
```

```
   29.515141  34.933609  37.308211  43.595450  46.018728 ]
```

为了保证前 20 个本征能量均收敛，再次往上选取 20 个基组至 $M = 60$ 得到结果如下：

```
[  0.159706   0.483597   0.836079   1.230015   1.740876
   2.288750   3.040978   3.754312   4.771611   5.638773
   6.935551   7.942768   9.532824   10.666176  12.563329
   13.808899  16.027015  17.370889  19.923861  21.352133]
```

可见此时结果仍然没有收敛。每次 20 个往上叠加基组个数，最终基组个数提升至 $M = 180$ 及以上时，第 20 个本征态能量已经在小数点后第 6 位上收敛。

1.5 关于势箱长度的选择

势箱长度的选择只需要包含前 20 个本征能量对应波函数即可，最开始取 $L = 20$ 得到的图像如下图所示：因此取 $L = 5$ 即可满足要求。

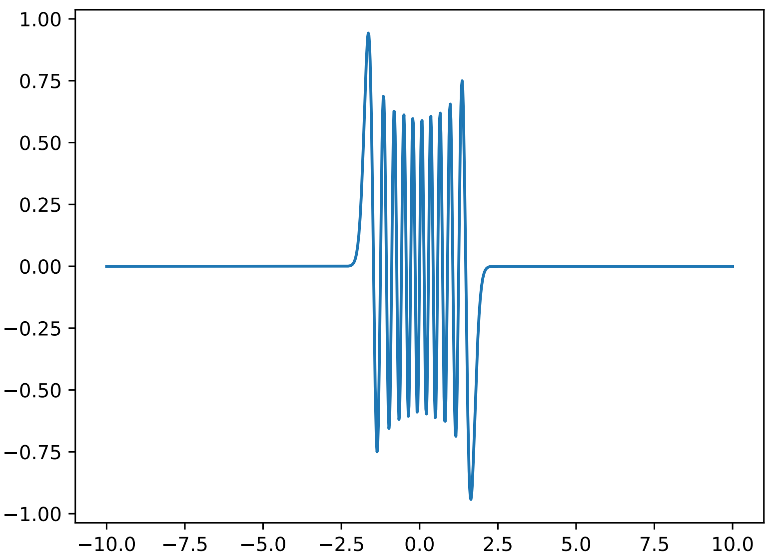

图 3: $L = 20$ 时候谐振子对应量子数 $n = 20$ 的波函数

2 经典谐振子的周期轨道

2.1 解析解

哈密顿量 $H(x,p)=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 根据哈密顿正则方程

$$\begin{cases} \dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial x}=-\partial_x V(x) \\ \dot{x}=\dfrac{\partial H}{\partial m}=\dfrac{p}{m} \end{cases} \tag{1}$$

因此 $\ddot{x}=-\omega^2 x$，$x=c_1\sin\omega t+c_2\cos\omega t$ 又根据初始条件

$$\begin{cases} x(t=0)=x_0 \\ p(t=0)=p_0 \end{cases} \tag{2}$$

解得

$$\begin{cases} x(t)=\dfrac{p_0}{m\omega}\sin\omega t+x_0\cos\omega t \\ p(t)=-m\omega x_0\sin\omega t+p_0\cos\omega t \end{cases} \tag{3}$$

2.2 代码实现

代码参见”第二题向前欧拉法.py”和”第二题 Velocity Verlet 算法.py”。

2.3 结果展示

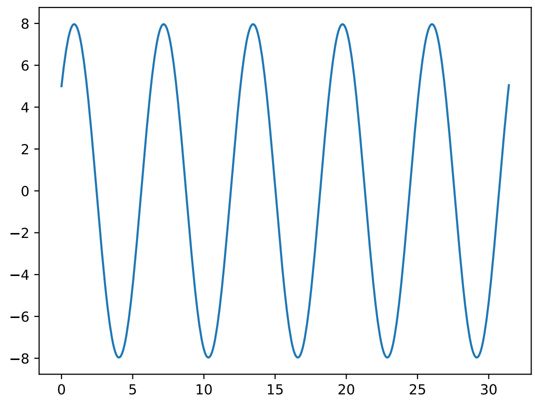

图 4: $x-t$ 图

笔者采用向前欧拉法和 Velocity Verlet 算法两种不同的方法计算了能量随时间的变化，得到结果如图 7和图 8：

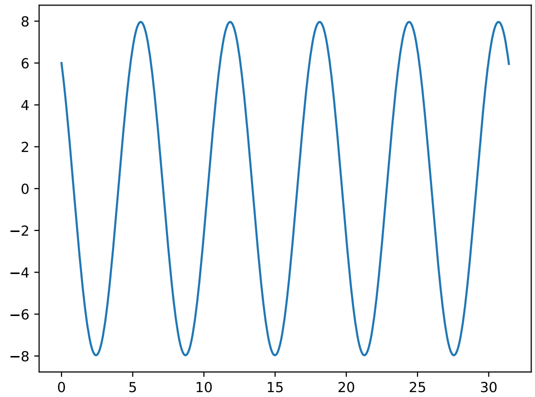

图 5: $p-t$ 图

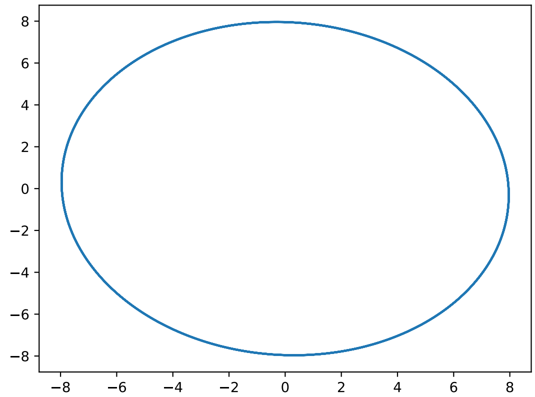

图 6: $x-p$ 图

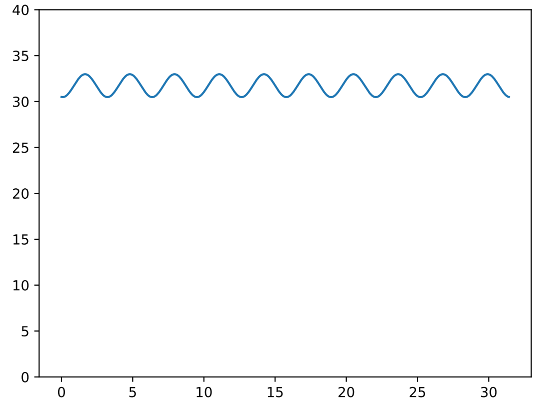

图 7: 向前 Euler 法得到的 $E-t$ 图

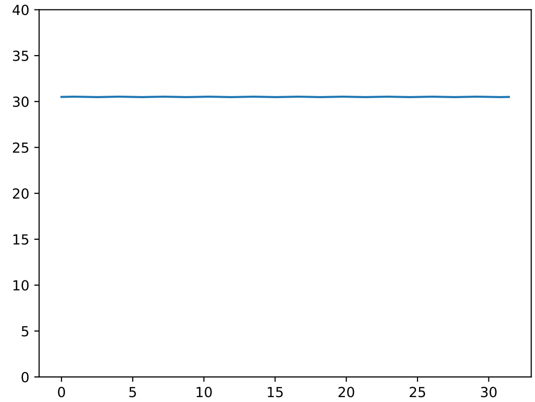

图 8: Velocity Verlet 法得到的 $E-t$ 图

从上述方法可以看出，Velocity Verlet 法是一种更好的数值近似方法。

3 谐振子解析解

3.1 波函数表达

代码参见“第三题计算波函数.py”。令 $c=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$，$k=\frac{m\omega}{2\hbar}$ 得到的波函数如下：（假设不考虑归一化系数）

$$
\begin{aligned}
&\phi_0(x)=ce^{-kx^2}\\
&\phi_1(x)=-2ckxe^{-kx^2}\\
&\phi_2(x)=4ck^2x^2e^{-kx^2}-2cke^{-kx^2}\\
&\phi_3(x)=-8ck^3x^3e^{-kx^2}+12ck^2xe^{-kx^2}\\
&\phi_4(x)=16ck^4x^4e^{-kx^2}-48ck^3x^2e^{-kx^2}+12ck^2e^{-kx^2}\\
&\quad\dots\\
&\phi_{19}(x)=-524288ck^{19}x^{19}e^{-kx^2}+44826624ck^{18}x^{17}e^{-kx^2}-1524105216ck^{17}x^{15}e^{-kx^2}+26671841280ck^{16}x^{13}e^{-
\end{aligned}
$$

如果考虑归一化系数的话,根据 $|\phi_{n+1}\rangle=\frac{\hat{a}_+}{\sqrt{n+1}}|\phi_n\rangle$,我们得到 $\langle x|\phi_n\rangle=\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}ce^{-kx^2}H_n(\sqrt{k}x)$ 其中 $H_n(x)$ 为 Hermite 多项式：

$$
H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}^n x}(e^{-x^2}) \tag{4}
$$