

# 计算物理 hw19

PB18020616 李明达

December 2020

## 摘要

这是计算物理第 19 次作业，作业题目是用 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。

## 1 原理、算法和程序

### 1.1 原理和算法

Numerov 法专用于求解如下形式的二阶微分方程：

$$\phi'' = F(\phi, x) = f(x)\phi(x)$$

薛定谔方程刚好满足这个形式，波函数  $\Phi$  满足：

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2}\Phi$$

其中相应的  $f(x)$  是  $f(x) = -\frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2}$

对于迭代方程：

$$(1 - \frac{h^2 f_{n+1}}{12})\phi_{n+1} = 2(1 - \frac{h^2 f_n}{12})\phi_n - (1 - \frac{h^2 f_{n-1}}{12})\phi_{n-1} + h^2 f_n \phi_n + O(h^6)$$

作变量代换： $y(x) = [1 - \frac{h^2 f(x)}{12}]\phi(x)$

具体计算用下面这个式子：

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 f_n \phi_n + O(h^6)$$

为简单起见，我准备研究无穷势阱：

$$V(x) = \begin{cases} 0, |x| < \frac{R}{2} \\ \infty, |x| > \frac{R}{2} \end{cases}$$

理论可以计算解析解：

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mR^2}$$

其本征函数是一堆三角函数：

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{R}} \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right) \quad \text{or} \quad \sqrt{\frac{2}{R}} \sin\left(\frac{n\pi x}{R}\right)$$

其中  $\cos$  对应  $n$  是奇数， $\sin$  对应  $n$  是偶数。

## 1.2 程序

本实验中，由于能量里有  $\hbar$ ，这是个很小的量，会影响模拟精度，所以为简单起见，我对能量取了无量纲化，令  $E' = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ，我们以后只用  $E'$ 。除此之外，我们取  $R=1$ ，所以此时我们能量的理论值为  $E = \frac{n^2 \pi^2}{R^2} = n^2 \pi^2$ 。

本实验中，我通过 SchrodingerEq(double energy) 计算波函数，并将波函数的迭代点写入“wavefunc.txt”中，最后根据不同的能量值给 txt 文件排序。这个函数的算法如我上面所述，由左边无边界的初始值，通过迭代  $y$ ，然后计算出  $\phi$ 。值得一提的是，我在区间之外还选了 500 个点，用于检测我选的能量是否为本征能量。

## 2 实验结果

本实验中， $R=1$ ，我在  $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$  之间选取了 10000 个点。从  $x=-1/2$  开始迭代，初始值为  $y[-1/2]=0, y[-1/2+0.0001]=0.1$ 。在  $x>1/2$  之外，我也选取了 500 个点，用来看迭代所用能量是否为本征能量。由于我采用无穷势阱，而数值模拟无法做到真正的无穷，所以我取此时势能为一个非常大的数：570000000(单位是无量纲化之后的能量)即：此时  $f=-570000000$ （因为我已经做了单位换算），对于我们模拟的范围  $n=1, 2, 3, 4, 5$ ，此数字远大于  $n^2 \pi^2$ ，认为是无穷大是合理的！

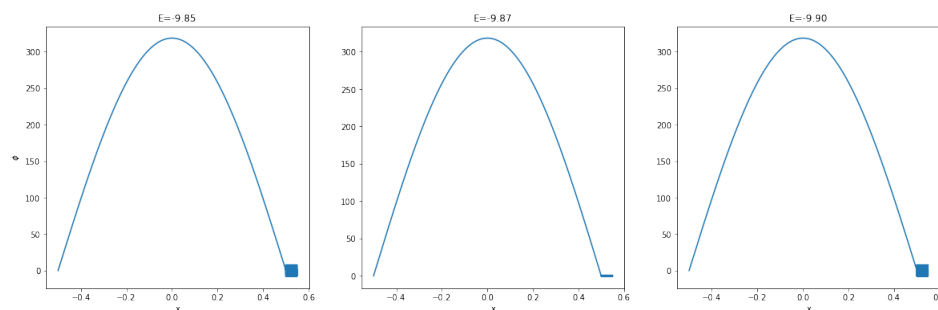


图 1: 找  $N=1$  时本征值所用的三幅图，中间一幅图是正确的本征值，两边的分别是小了和大了，本征值的判定显而易见。

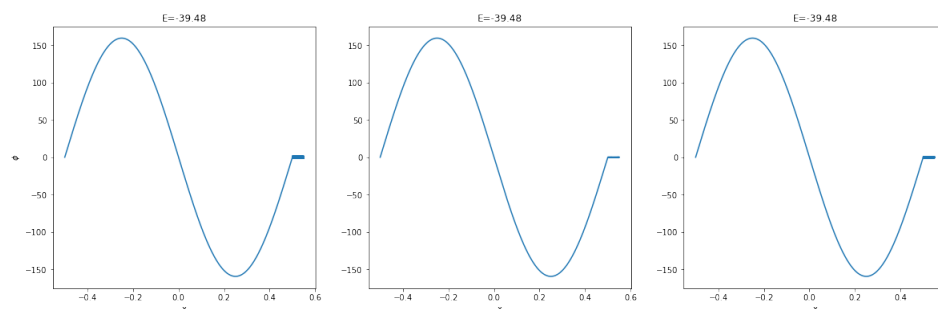
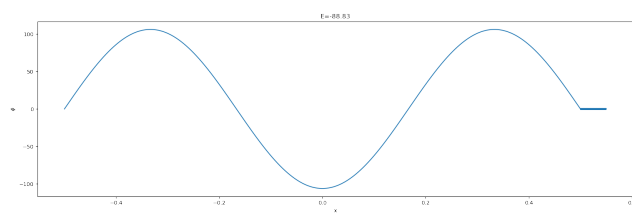
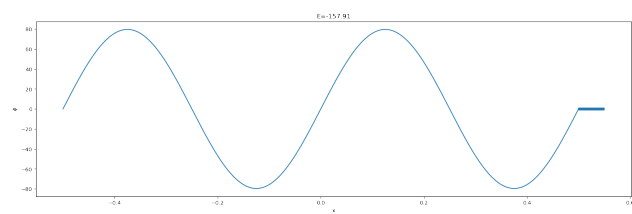


图 2: 找  $N=2$  时本征值所用的三幅图，中间一幅图是正确的本征值，两边的分别是小了和大了，本征值的判定显而易见。

我最终分别模拟了  $n=1,2,3,4,5$  的波函数，对于一个特定的能量，给定波函数在  $-0.5$  处的初始值，通过其在大于  $0.5$  后的波函数大小来判断该能量是否是能量本征值。如果是本征值，则另一端也应该符合相应的边界条件（如图 1、2 中间）。如果不是本征值，那么在另一端会有涨落起伏（如图 1、2 的左图和右图，会有小尾巴出现）。

除此之外，因为从图像不那么容易分辨，我们可以直接比较”小尾巴”涨落的幅值，幅值越小，说明越靠近本征值。我们通过比较  $N=2$  时的三个能量，一个是  $-39.48$ ，一个是  $-39.49$ ，另一个是  $-39.50$ ，我发现，他们小尾巴的涨落分别为  $0.8$ ， $0.1$ ， $1.1$ 。非常容易看到， **$-39.49$  是更接近本征能量的值！**通过类似的办法我们可以得出  $n=3, 4, 5$  的本征能量，如表 1 所示。

其次， $n=3, 4, 5$  本征能量对应的波函数图我也在图 3、4、5 所示。可见，其后面的小尾巴基本上都没有起伏，所以这三个值分别是对应的本征能

图 3:  $N=3$  的时候的波函数分布图 4:  $N=4$  的时候的波函数分布

量。

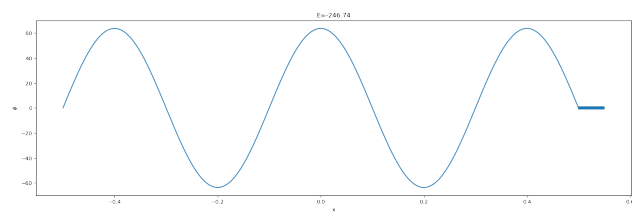
图 5:  $N=5$  的时候的波函数分布

表 1: 模拟结果和理论结果的对比（已经对能量取了更方便的量纲，见 1.2 程序部分）

N	Theory	Simulation
1	-9.87	-9.87
2	-39.48	-39.49
3	-88.83	-88.83
4	-157.91	-157.91
5	-246.74	-246.74