计算物理第三次开卷考试

姚铭星 1700011321

1 第一题：原子的激发谱

1.1 基态的求解

对于数值求解不含时薛定谔方程：

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E_n\psi(x) \tag{1}$$

可以将二阶导数该为有限差分

$$\partial_x^2\psi\left(x_i\right)=\frac{\psi\left(x_{i+1}\right)-2\psi\left(x_i\right)+\psi\left(x_{i-1}\right)}{(\Delta x)^2}+o\left((\Delta x)^2\right) \tag{2}$$

这样可以将哈密顿量表示为三对角对称矩阵的形式：

$$(H_0)_{ij}=\begin{cases}\frac{1}{(\Delta x)^2}-\frac{1}{\sqrt{x_i^2+2}}, & i=j\\ \frac{-1}{2(\Delta x)^2}, & |i-j|=1\\ 0, & |i-j|>1\end{cases} \tag{3}$$

注意，此处已经使用了边界条件：

$$\psi(x_{-1})=\psi(x_N)=0 \tag{4}$$

这样问题变为求解本征值问题：

$$H_0\psi=E_0\psi \tag{5}$$

由于已经给定近似的能量值 $E_0=-0.48$, 利用原点位移的方法可以直接将问题转化为求解差值的问题。这样可以保证反幂法的顺利运行。

定义新的矩阵 A 为：

$$A=H_0+0.48I \tag{6}$$

此时利用 Cholesky 分解 (在第一次作业中已经实现过) 实现类似于求逆的操作

2 时间演化

对于加上电场之后的含时的薛定谔方程，与上问中的哈密顿量只差相差一个对角阵:

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + xE(t) \tag{7}$$

因此此时哈密顿量仍然保有三对角形式，并且为实对称矩阵。在时空上划定格点将方程离散化后得到：

$$\begin{aligned} \psi_i^{(j)} &= \psi\left(x_i, t_j\right) \\ i\frac{\psi_i^{(j+1)} - \psi_i^{(j)}}{\Delta t} &= \mathcal{H}(t)\psi(t) \end{aligned} \tag{8}$$

为了保证体系的守恒量不受破坏，我们采用辛算法 Crank-Nicolson（欧拉中点算法），其格式为：

$$\mathrm{i}\frac{\psi_i^{(j+1)} - \psi_i^{(j)}}{\Delta t} = \sum_l H\left(t_{j+1/2}\right)_{il}\psi_l\left(t_{j+1/2}\right) = \sum_l \frac{1}{2}H\left(t_{j+1/2}\right)_{il}\left(\psi_l^{(j)} + \psi_l^{(j+1)}\right) \tag{9}$$

这样，每一步递推变成求解线性方程问题：

$$\left(1 + \frac{\mathrm{i}\Delta t}{2}H\left(t_{j+1/2}\right)\right)\psi^{(j+1)} = \left(1 - \frac{\mathrm{i}\Delta t}{2}H\left(t_{j+1/2}\right)\right)\psi^{(j)} \tag{10}$$

而不难发现，此时的 Crank-Nicolson 形式有幺正性质，即满足：

$$U_j U_j^{\dagger} = 1 \tag{11}$$