计算物理学 (A) 第三次大作业 第 3 题

截止日期：6 月 24 日

1 含时薛定谔方程

我们考察一个一维量子波包随着时间的演化。初始时刻的电子被视为一个波包，在无穷深势井中运动，由于波包解并非哈密顿量的本征解，波函数会随着时间演化。

假设初始时刻电子位于空间位置 $x = 5$，具有动量 k_0 (取 $\hbar$=1)，波函数为一个高斯波包

$$\psi(x, t = 0) = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-5}{\sigma_0}\right)^2\right] e^{ik_0 x} \tag{1}$$

其中 σ_0 是波包的展宽。图1画出了一个初始时刻为波包的电子，其概率密度分布随着时间的演化，波函数逐渐变得弥散，并且不停地在两端与势井壁发生碰撞。图2是一个电子波包在谐振子势中的运动，因为波包解是谐振子势的本征解，在振荡了一个周期之后，波包回到了初始的形状。

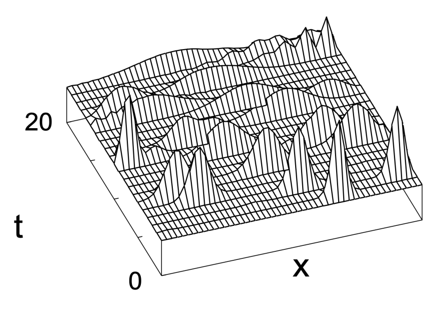

图 1: 一维电子波包在无穷深势井中随时间的演化。

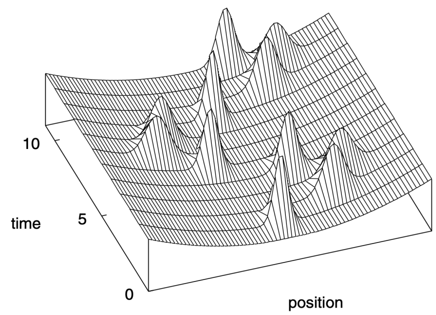

图 2: 一维电子波包在谐振子势中随时间的演化。

波函数的演化遵从含时薛定谔方程

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\tilde{H}\psi(x,t)=-\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t) \tag{2}$$

这里将 $2m=\hbar=1$ 来简化方程。通过将波函数拆成实部和虚部，可以将这个复数域上的方程分解成两个实数域上的方程

$$\begin{aligned} \psi(x,t)&=R(x,t)+iI(x,t)\\ \Rightarrow\quad \frac{\partial R(x,t)}{\partial t}&=-\frac{\partial^2 I(x,t)}{\partial x^2}+V(x)I(x,t)\\ \frac{\partial I(x,t)}{\partial t}&=+\frac{\partial^2 R(x,t)}{\partial x^2}-V(x)R(x,t) \end{aligned} \tag{3}$$

这两个耦合的偏微分方程可以通过隐式的方法（求解大型矩阵）或者显式的方法（蛙跳算法）来进行求解。这里介绍一种交错网格的蛙跳算法。波函数的实部在整数倍的时间步长上计算 $(0,\Delta t,\cdots)$ 而虚部在半整数的时间步长上计算 $(\frac{1}{2}\Delta t,\frac{2}{3}\Delta t,\cdots)$. 该算法基于对 R 和 I 的泰勒展开

$$\begin{aligned} R\left(x,t+\frac{1}{2}\Delta t\right)=&R\left(x,t-\frac{1}{2}\Delta t\right)+[4\alpha+V(x)\Delta t]I(x,t)\\ &-2\alpha[I(x+\Delta x,t)+I(x-\Delta x,t)] \end{aligned} \tag{4}$$

其中 $\alpha=\Delta t/2(\Delta x)^2$. 在离散形式下 $(R_{x=i\Delta x}^{t=n\Delta t})$，有

$$\begin{aligned} R_i^{n+1}&=R_i^n-2\alpha\left[I_{i+1}^n+I_{i-1}^n\right]+\left[4\alpha+V_i\Delta t\right]I_i^n\\ I_i^{n+1}&=I_i^n+2\alpha\left[R_{i+1}^n+R_{i-1}^n\right]-\left[4\alpha+V_i\Delta t\right]R_i^n \end{aligned} \tag{5}$$

其中，脚标 n 代表时间，i 代表位置。概率密度 $\rho=\psi^\dagger\psi$ 由三个不同的时刻

计算

$$\rho(t) = \begin{cases} R^2(t) + I\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) I\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right), & \text{for integer } t \\ I^2(t) + R\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) R\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right), & \text{for half-integer } t \end{cases} \tag{6}$$

时间步长要取地足够小，以确保总概率 $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\rho(x,t)$ 在误差允许范围内是守恒的。

试求：

- 无穷深势井具有形式

  $$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \text{ or } x > 15 \\ 0, & 0 \le x \le 15 \end{cases} \tag{7}$$

  电子位于势井中，初始波函数为式1. 取 $\sigma_0 = 0.5, k_0 = 17\pi$ 空间网格间距为 $\Delta x = 0.02$，时间步长取为 $\Delta t = \frac{1}{2}\Delta x^2$. 注意在计算概率密度时两个端点要取成 0. 画出概率密度分布随时间的演化。

- 现考虑谐振子势

  $$V(x) = 5x^2 \quad (-\infty \le x \le \infty) \tag{8}$$

  初始的电子波包的动量取为 $k_0 = 3\pi$，空间和时间步长分别取为 $\Delta x = 0.02$ 和 $\Delta t = \frac{1}{4}\Delta x^2$. 同样画出概率密度分布的演化。