



一维谐振子量子力学方程数值求解

吉林大学物理学院

张忻宁 11230708

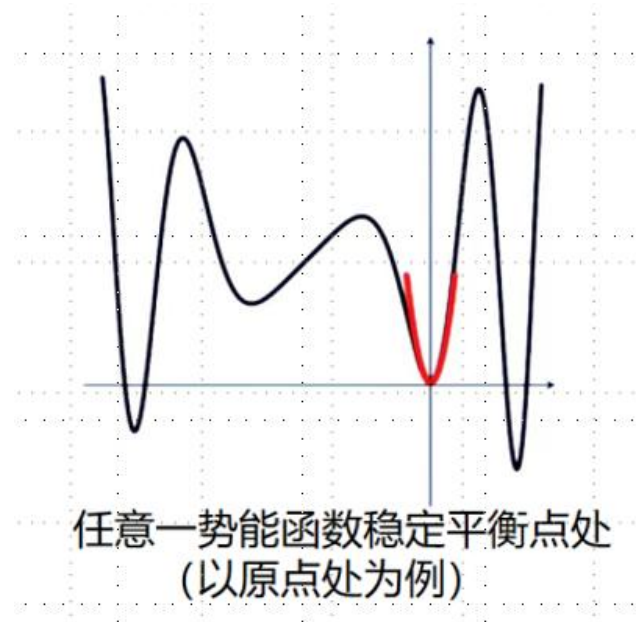
微观实物粒子具有波动性，同实物粒子联系的波称之为德布罗意波，通常用符号 ψ 表示，称之为波函数。

对于微观粒子的复杂的势能函数，在极小值点的微小扰动，可以近似看作谐振子的势能函数。（如图）

对比经典谐振子，量子谐振子的求解方程是以薛定谔方程为基础求解，其解（波函数）的物理意义也不同：

经典力学中所求得的是位置与势能的关系，而波函数本身并无具体实意，而其模的平方具有实意，表达的是实物粒子出现在该位置的概率，是一种概率分布的函数。爱因斯坦根据对双缝干涉实验，从波动角度和光子角度对比两套体系，推断出波函数及其模的平方的物理意义。

因此，根据薛定谔方程，我们可以求出量子谐振子的波函数和概率分布函数



定态薛定谔方程： $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$

对于一维空间，我们将偏微分符号化为微分符号，即 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V\psi = E\psi$

其中， V 表示势能项，只关于 x 的函数，不含时间（因此“定态”），对于一维谐振子可表示为 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ； E 是一个常量，是在给定态下，实物粒子具有的能量

首先我们自定义 $m=1$ ； $\omega=1$ ； $\hbar=1$ （自然单位制）

因此，可将上面公式化为：

$$\left\{ \begin{array}{l} V(x) = \frac{1}{2}x^2 \\ \left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 \right] \psi = E\psi \end{array} \right.$$

定义为 \hat{H} （哈密顿算符）

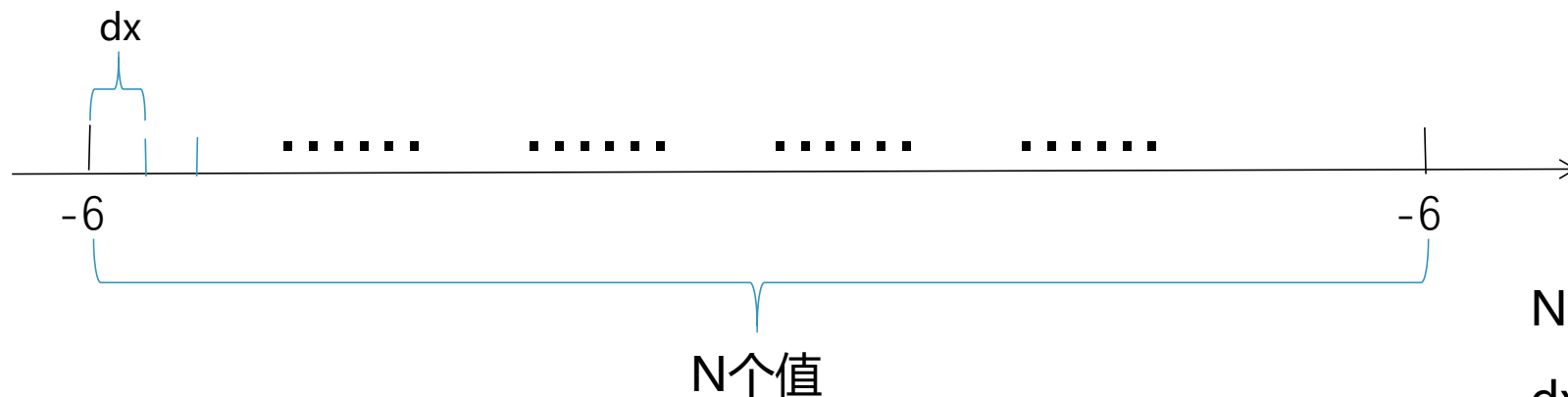
接着我们采用python对这个方程求解 $[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2]\psi = E\psi$

由于计算机运行是不连续的，因此我们要将网格空间离散化，这里我们离散成矩形网格，每个网格的点即为我们离散的点，以这段代码为例（先对横坐标进行离散化）：

```
N = 3000
x_min = -6
x_max = 6
dx = (x_max - x_min) / N
x = np.linspace(x_min, x_max, N)
```

语法： `np.linspace(start, stop, num)`

我们取 $x \in [-6, 6]$ 的范围，根据numpy库的linspace函数划分均匀间隔的数值序列



N表示在-6到6之前均匀生成N个数值
dx表示步长，指两个数值之间的长度

引入离散化思路后，我们对所求方程进一步理解

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2$$

我们将x坐标离散化后，最终所求出来的波函数实际上相当于一组数组，或是说向量，定义为态矢，即 $|\psi\rangle$ 因此我们构造哈密顿算符为一个矩阵，波函数相当于该矩阵的本征向量（特征向量）；能量E相当于该矩阵的本征值（特征值）。

接着下一步，我们构建一个N*N的哈密顿矩阵，N个列向量每个值对应上一页中取的N个等间隔数列，N个横向量每个值解出来后对应波函数取值

由于动能项中含有导数，因此我们用有限差分法表示

*差分法公式推导：（使用二阶中心差分法近似动能项中二阶导数）

$$\left. \begin{aligned} U(x + \Delta x) &= U(x) + \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + o(\Delta x^5) \\ U(x - \Delta x) &= U(x) - \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + o(\Delta x^5) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{整理出二阶导项，可得} \\ \frac{U(x + \Delta x) + U(x - \Delta x) - 2U(x)}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \boxed{\frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + o(\Delta x^5)} \end{array}$$

截断，2阶精度

$$\frac{U(x + \Delta x) + U(x - \Delta x) - 2U(x)}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \longrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m dx^2} (\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}) = -\frac{1}{2 dx^2} (\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1})$$

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} x^2 \psi = E \psi \quad \text{将势能项作用在波函数, 和动能项作用在波函数, 分别写成矩阵表示的形式}$$

*势能项 (V代替1/2x²)

$$\begin{bmatrix} V & & & & \\ & V & & & \\ & & V & & \\ & & & \dots & \\ & & & & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \dots \\ \varphi_N \end{bmatrix} = [V\varphi_1 \quad V\varphi_2 \quad V\varphi_3 \quad \dots \quad V\varphi_N]$$

将动能项和势能项放入所要构建的矩阵的对角线时, 才能将每点的动能和势能正确的作用到每一点上。另外, 由于有限差分法的将动能项近似, 因此在主对角线上下两个对角线上也要填充值, 进而满足近似, 具体数值: (其中dx为步长)

$$-\frac{1}{2dx^2} (\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1})$$

↓

$$-1/2dx^2 * \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & & & \\ & \dots & & & \\ \text{第n行} & & & & \\ & & & & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \dots \\ \varphi_n \\ \dots \\ \varphi_N \end{bmatrix}$$

n-1 第n列 n+1

*以第n行为例, 讲述构建矩阵:

第n行乘上列向量, 作为结果向量的第n个值, 其值就是 $\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}$ 的形式;

因此对于第n行, 其第n列的值为-2, 第n-1列的值为1, 第n+1的值为1, 特别的对于第一行, n-1列为 ψ_0 , 由于我们令边界值为零, 因此忽略不计

(波函数模的平方表示的是实物粒子的概率分布, 在无穷远时概率为零, 由于我们计算中是取一部分空间, 因此令空间边界值为0)

*固定语法

```
p = - h_bar**2 / (2*m) * diags ([-2,1,1],[0,1,-1],shape=(N,N)) / dx**2

V = 1/2 * m * omega ** 2 * x ** 2
V_JZ = diags (V,0,shape=(N,N))

H = p + V_JZ
```

构建动能项：用diags函数构建对角线满足 $-\frac{1}{2dx^2}(\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1})$ 的N*N矩阵

diags括号内，第一个数组表示 $-1/2dx^2$ 分别乘上-2, 1, 1。第二个括号表示将刚刚乘好的数值带入第0（对角线），1（对角线上一行次对角线），-1（对角线下一行次对角线）。

shape表示构建n*n的矩阵

构建势能项：根据上一页可知，直接带入对角线即可

```
eigenvalues, eigenvectors = eigsh(H,k=3,which='SA')
```

求解哈密顿矩阵对应的本征值，本征向量，（其中k表示所求本征值个数）

根据plt函数绘制图像

 ψ

```
plt.figure(figsize=(12, 12))

plt.subplot(2,1,1)
for i, eigenvector in enumerate(eigenvectors.T):
    plt.plot(x, eigenvector, label=f'n= {i+1}')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('ψ(x)')
plt.title('Energy Eigenstate')
plt.legend()
```

 p

```
plt.subplot(2,1,2)
for i, eigenvector in enumerate(eigenvectors.T):
    probability_density = eigenvector ** 2
    plt.plot(x, probability_density, label=f'n= {i+1}, E={eigenvalues[i]:.4f}')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('P')
plt.legend()
plt.show()
```

plt语法:

```
# 绘制线图, 并自定义外观
plt.plot(
    x,          # X轴数据
    y,          # Y轴数据
    marker='o', # 标记样式: 圆点
    linestyle='-', # 线条样式: 实线
    color='green', # 线条颜色: 蓝色
    linewidth=2, # 线宽: 2
    markersize=10, # 标记大小: 8
    label='数据1' # 图例标签
)

# 添加标签和标题
plt.xlabel('X轴标签')
plt.ylabel('Y轴标签')
plt.title('标题')

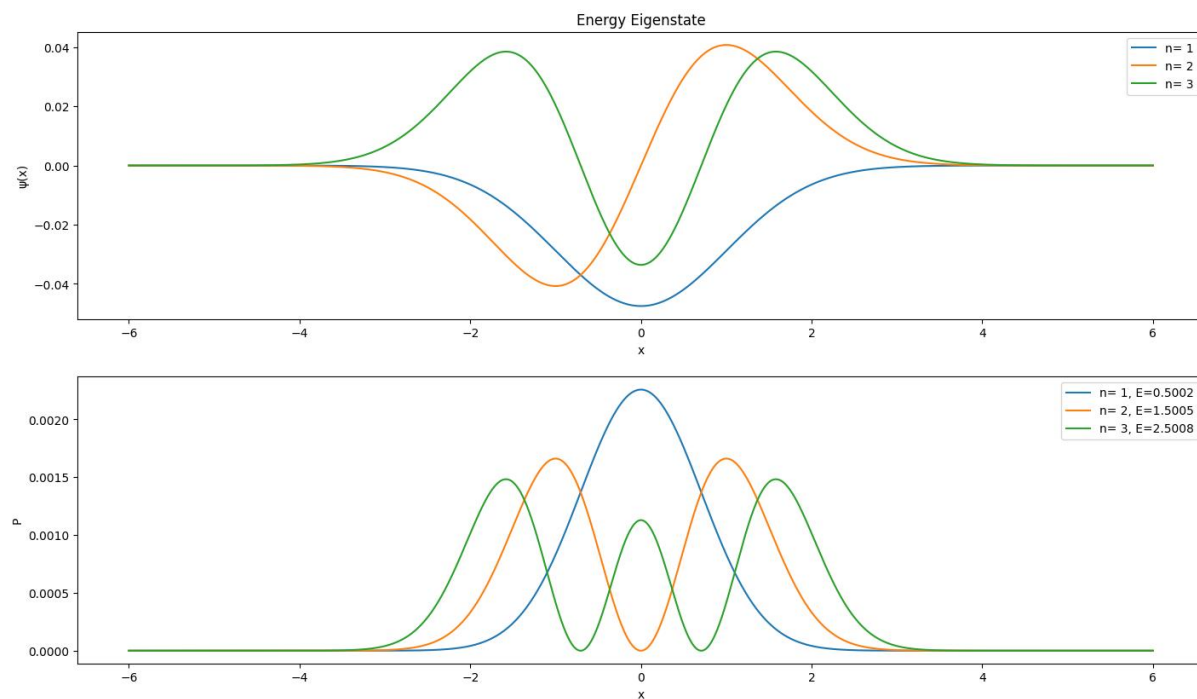
# 添加图例
plt.legend()

# 显示网格线
plt.grid(True)

# 自定义刻度
plt.xticks([1, 2, 3, 4, 5],

# 显示图表
plt.show()
```

绘制图像结果：



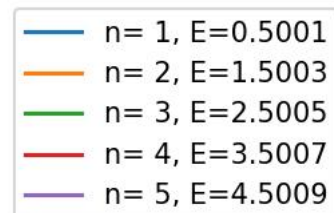
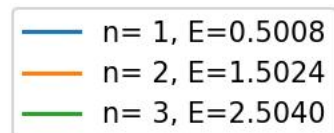
代码：



sda.txt

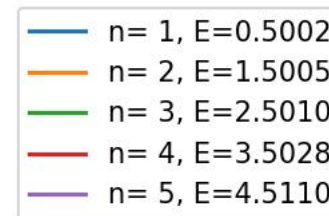
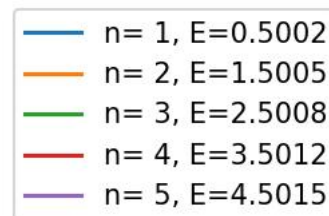
分析能量误差原因：

1, 与步长有关, 步长越小精度越高,
下图为同等网格结构下, $N=600$ 的结果



N 取6000时, 误差明显减小了

2, 当网格大小不够大时, 会导致函数成像不完整, 相应的能量计算有误差, 所以要保证网格大小足够大



总长 $l=10$

$l=8$

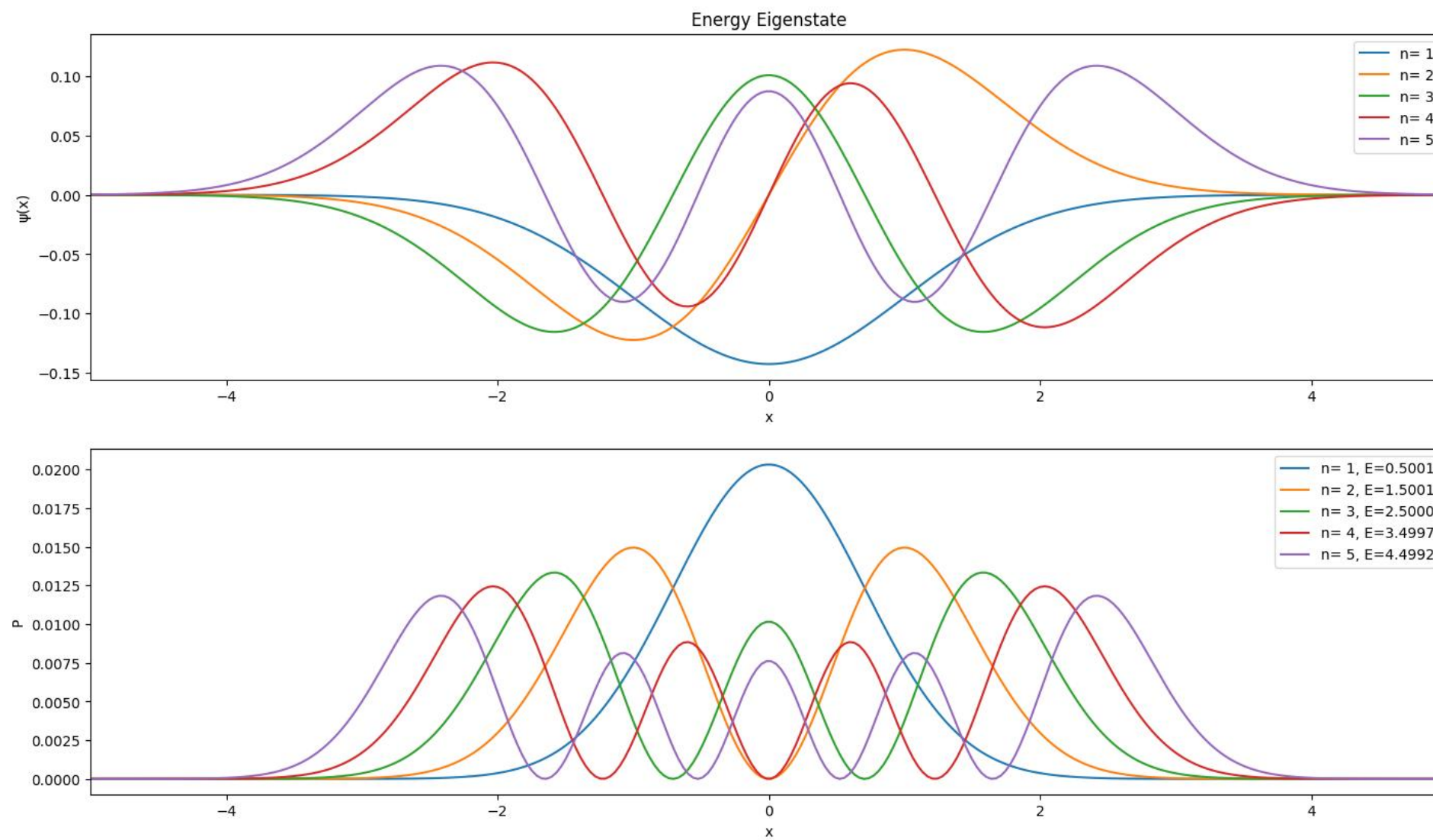
	$x \in [-4, 4]$	$x \in [-5, 5]$
n=3000	<div> <div>n= 1, E=0.5002</div> <div>n= 2, E=1.5005</div> <div>n= 3, E=2.5010</div> <div>n= 4, E=3.5028</div> <div>n= 5, E=4.5110</div> </div>	<div> <div>n= 1, E=0.5002</div> <div>n= 2, E=1.5005</div> <div>n= 3, E=2.5008</div> <div>n= 4, E=3.5012</div> <div>n= 5, E=4.5015</div> </div>
n=5000	<div> <div>n= 1, E=0.5001</div> <div>n= 2, E=1.5003</div> <div>n= 3, E=2.5007</div> <div>n= 4, E=3.5024</div> <div>n= 5, E=4.5105</div> </div>	<div> <div>n= 1, E=0.5001</div> <div>n= 2, E=1.5003</div> <div>n= 3, E=2.5005</div> <div>n= 4, E=3.5007</div> <div>n= 5, E=4.5009</div> </div>
n=7000	<div> <div>n= 1, E=0.5001</div> <div>n= 2, E=1.5002</div> <div>n= 3, E=2.5006</div> <div>n= 4, E=3.5022</div> <div>n= 5, E=4.5102</div> </div>	<div> <div>n= 1, E=0.5001</div> <div>n= 2, E=1.5002</div> <div>n= 3, E=2.5004</div> <div>n= 4, E=3.5005</div> <div>n= 5, E=4.5007</div> </div>

对比之下可以得出：
减小步长，可以减小误差
图像取值范围不够，会带来误差

误差最小

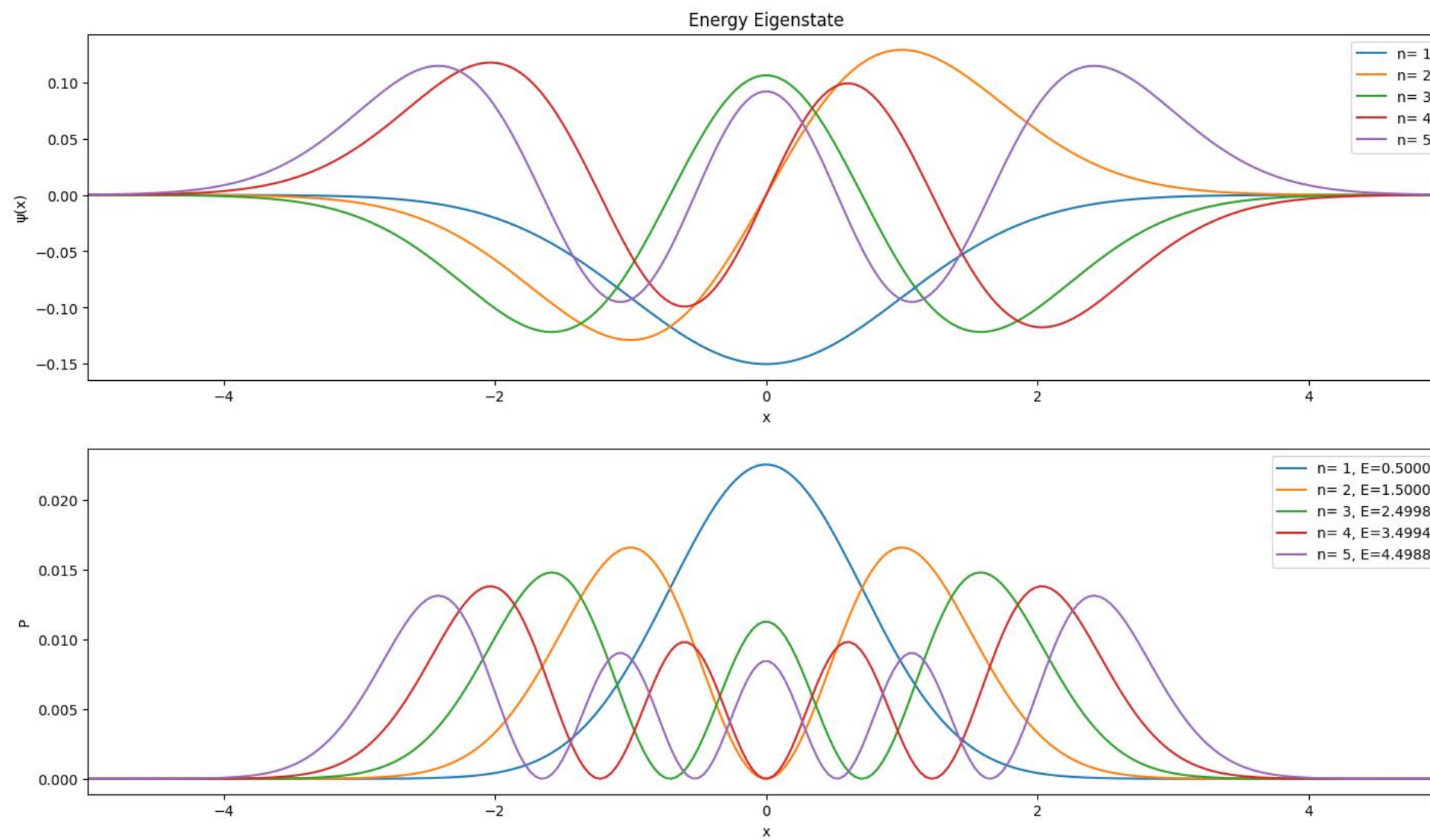


$N=5000$ $2x=90$





$N=5000$ $2x=100$





无限高势垒之间的一维运动

吉林大学物理学院

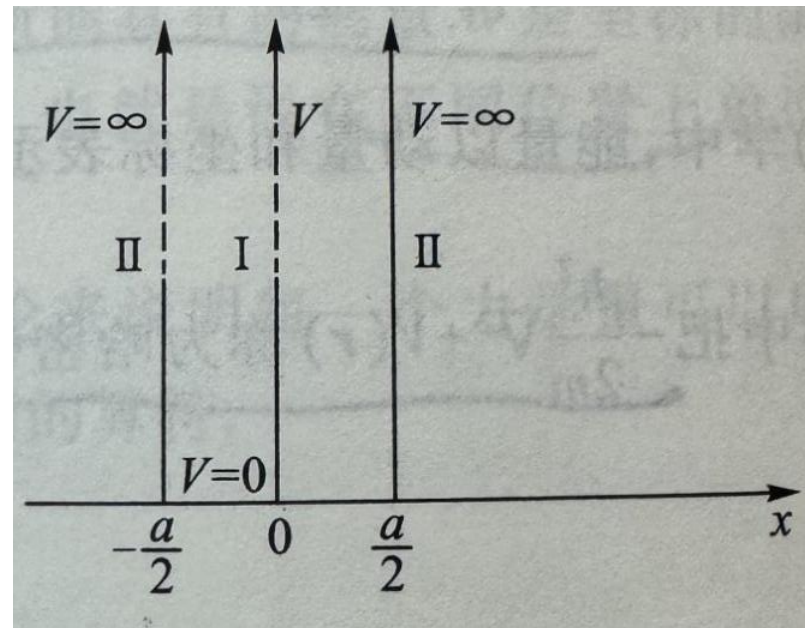
一个粒子在两个势垒之间运动.势垒位于 $x = +\frac{a}{2}$ 和 $-\frac{a}{2}$.在无限高势垒之间, 势能 $V=0$, 在势垒之外 $x > \frac{a}{2}$ 和 $x < -\frac{a}{2}$, $V=\infty$, 一个具有有限能量的粒子, 按照经典力学, 只能在I区运动, 它的能量可以取任何值.量子力学对这个问题怎样看呢?

定态薛定谔方程: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$

在I区, $V=0$, 因此方程为

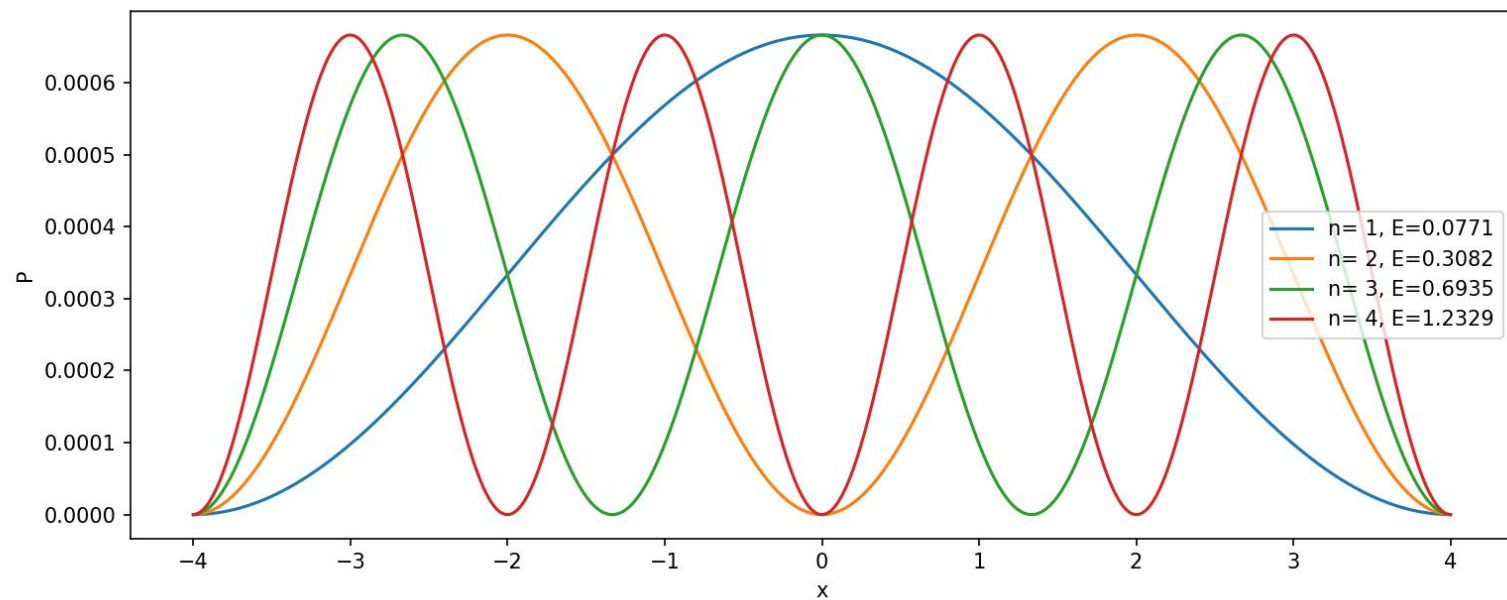
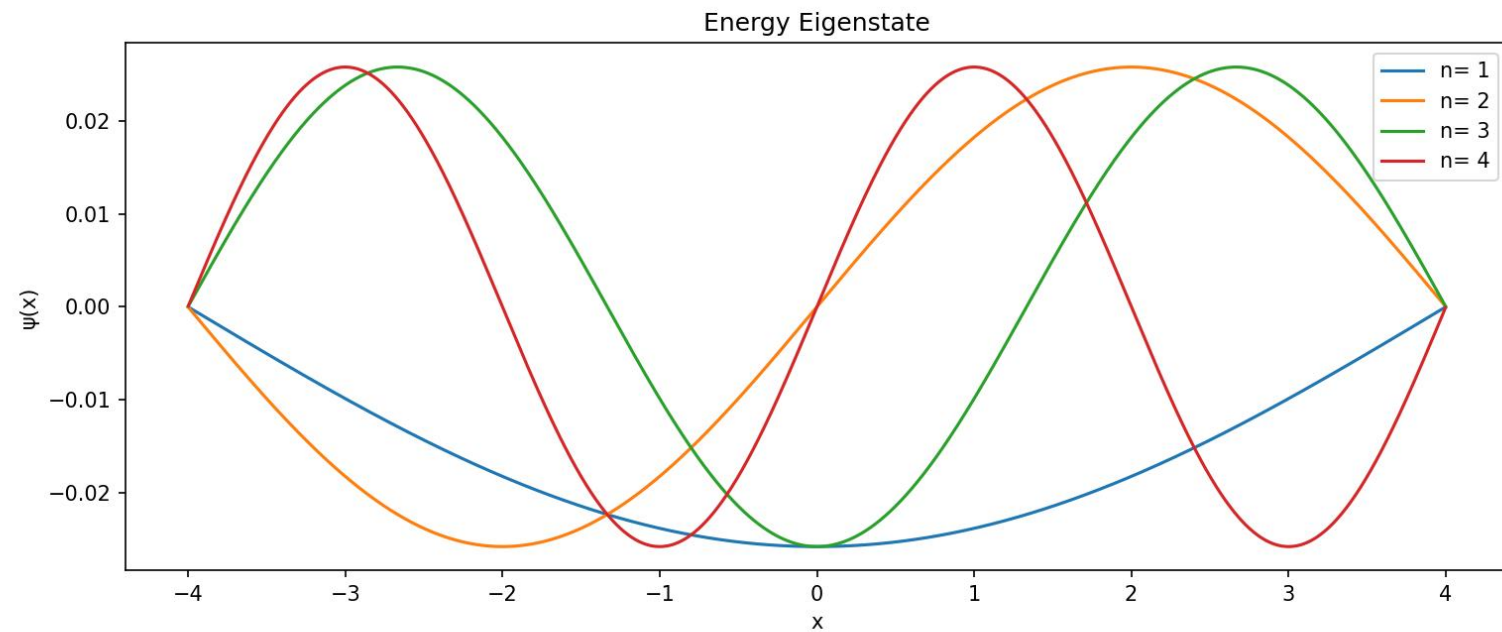
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$



```
m = 1
h_bar = 1
pi = np.pi
N = 3000
x_min = -4
x_max = 4
dx = (x_max - x_min) / N

print('a/2=', x_max)
```



请老师指正！

谢谢观看