numerov 求解 np 束缚态

2023 年 4 月 25 日

求解一定束缚态下 n,p 系统波函数

利用分离变量法将系统运动分为质心运动以及相对运动两部分

对于相对运动部分可以转化为求解如下微分方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)+V(r)-E\right]u_l(r)=0 \tag{1}$$

对应的边界条件及约束条件为：

$$\begin{gathered} u_l(0)=0 \\ u_l(r)\propto W_{-\eta,l+\frac{1}{2}}\left(-2k_l r\right) \ \text{当} r\geq a \end{gathered} \tag{2}$$

- 该微分方程可以写作

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2(x)\right)\psi(x)=0 \tag{3}$$

numerov 数值方法

- 利用泰勒展开的得到如下递推式

$$\psi(x+h)=\frac{2\left(1-\frac{5}{12}h^2k^2(x)\right)\psi(x)-\left(1+\frac{1}{12}h^2k^2(x-h)\right)\psi(x-h)}{1+\frac{1}{12}h^2k^2(x+h)} \tag{4}$$

- 对于所解问题对应的 $k^2(x)$ 有

$$k^2(r)=-\frac{(l+1)l}{r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)] \tag{5}$$

- $$V(r)=V_0\exp\left(-r^2/a^2\right)\qquad a=1.484$$

- numerov 算法很好地利用了微分方程的形式，相比于中心差分等具有普遍性的数值方法，在利用附近较少近似值的前提下能够获得较高的精度

程序运行情况

- 格点大小几乎不影响收敛情况，只影响收敛精度
- irmid 相遇点的取值几乎不影响收敛情况
- 由于循环结束条件，对于不同的初值 V_0 收敛值存在一定区间，区间大小可通过更改循环结束的判断条件来调整。

表:

V_0	V
$[-8, -72.167]$	-72.167
$[-72.167, -72.173]$	V_0
$[-72.173, -161]$	-72.173
$[-162, -375.738]$	375.738
$[-375.738, -375.769]$	V_0

结果展示

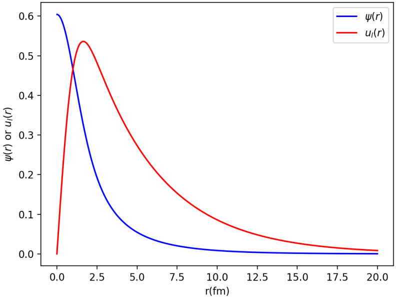

图: 波函数及约化波函数图像

动量表象求解

- 求解束缚态薛定谔方程
  $(E-H)|\phi\rangle=0 \rightarrow |\phi\rangle=\frac{1}{E-T}V|\phi\rangle$
- 将波函数投影到动量坐标下并进行展开

$$\langle klm \mid \phi\rangle=\int_0^{\infty} \frac{1}{E-\frac{(\hbar k)^2}{2\mu}} V_l\left(k, k'\right)\left\langle k' lm \mid \phi\right\rangle k^2 dk'$$

  - $V_l\left(k, k'\right)$ 为动量表象的势

$$\langle k' lm|V|klm\rangle=\frac{2}{\pi} \frac{1}{k' k} \int_0^{\infty} F_l\left(k' r\right) V(r) F_l(kr) dr$$

- 将积分运算转化为求和运算得到:

$$\phi\left(k_i\right)=\sum_j k_j^2 \omega_j \frac{1}{E-\frac{k_i^2}{2\mu}} V_l\left(k_i, k_j\right) \phi\left(k_j\right)$$

动量表象求解

- 上述求和运算即对应着 $\lambda\phi = \mathbf{A}\phi$

$$\mathbf{A}_{ij} = k_j^2 \omega_j \frac{1}{E - \frac{k_i^2}{2\mu}} V_l\left(k_i, k_j\right)$$

将问题转化为：寻找合适的 E 使得能够使得矩阵 $\mathbf{A}$ 对应的本征值 $\lambda = 1$

- 采用弦截法（Secant method）
  - 选取两个初始值 E_1, E_2，写出对应的矩阵 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2$，并求解对应的本征值 λ_1, λ_2
    ：$E_{n+1} = E_n - \frac{E_{n-1} - E_n}{\lambda_{n-1} - \lambda_n}\left(\lambda_n - 1\right)$
  - 迭代下去直到 $\left|E_{n+1} - E_n\right|$ 足够小
- 输出此时的本征向量即为 $\phi(k_i)$，并进行归一化