與時間無關的方程式

對於位勢不隨時間而改變的薛丁格方程式，我們已經知道它是可以被改寫簡化成（時間變數分離出來）為一個本徵值型的二階微分方程式

$$-\hbar^2/2m\ \nabla^2\ \varphi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\varphi(x) = E\ \varphi(\mathbf{x})$$

注意其中 E 與 φ (x) 皆為未知。當我們要用電腦計算的方法來求一個微分方程的數值解，就是解的要積分上式中帶有微分符號的部分，使未知函數變為已知。

這樣的一個問題裏，會出現兩種大不相同的解的型式，一是散射態、二是束縛態，在束縛態時最重要會出現的現象就是能量的量子化，也就是只有某些特定的能量值才是允許的。從計算的角度而言，允許與有是怎樣表現出來呢？是波函數能否被歸一化的基本要求。如果在某一個 E 值的試作下波函數發散了，它就沒有辦法被求出對整個空間的積分（無限大），因而也就沒有辦法歸一化它的波函數了。我們就認定這樣的 E 值是不允許的能量值，並且作其他的猜測，儘可能找出所有允許的 E 值與其對應的波函數解。

認識該數學問題的本質

已知與未知

$$-\hbar^2/2m\ \nabla^2\ \varphi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\varphi(x) = E\ \varphi(\mathbf{x})$$

認識該動學問題的本質

已知與未知

$$-\hbar^2/2m\ \nabla^2\ \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\ \varphi(x)$$

本徵值問題的微分方程式

什麼是"微分方程式"？

什麼是"本徵值"？

數值求解：將微分方程式積分

演算法：奧依勒演算法、隆巨庫塔 或 奧依勒－克洛瑪 (比較：奧依勒－理查遜) 演算法

微分方程式求解散之演算法簡介（待連結）

要積分的方程式，經整理後有以下型式

$$d^2/dx^2\ \varphi(x) = 2m/\hbar^2\,[V(x) - E]\,\varphi(x)$$

可化化為兩個聯立的一階常微方式：

$$d/dx\ \varphi(x) = \varphi'(x)$$

$$d/dx\ \varphi'(x) = 2m/\hbar^2\,[V(x) - E]\ \varphi(x)$$

注意參考上連結用下所這種 Euler Cromer 演算法來處理這種會抵消的部分如下（詳見參考 Gould & Tobochnic 的

$$d/dx\ \varphi'(x) = 2m/\hbar^2\,[V(x) - E]\ \varphi(x)$$

注意參考書上建議用下面這種 Euler-Cromer 演算法來處理這種會振盪的解就夠好了（詳見參考書 Gould & Tobochnic 內文）請注意斜率項是取 n+1 點上而非 n 點上的，也就是

$$\varphi'_{n+1} = \varphi'_n + \varphi''_{n+1}\,\Delta x$$

$$\varphi_{n+1} = \varphi_n + \varphi'_{n+1}\,\Delta x$$

我們也因此不必動用像 Runge-Kutta 那種較高階且較精密的演算法（詳見數值方法線上教材）。另外，若我們採行所謂的原子單位（atomic unit），則上式中的電子質量與卜朗克常數都可以設成 1。

初始值

在本節為了利於模擬示範以上說明的特性，我們採用了一個較為簡化了的情況，就是只處理 V(-x) = V(x) 這種以 y=0 為鏡面對稱這種型式的一維位勢。這樣的對稱性將保證其解必有明確的宇稱性（parity），意思就是說其解必定是奇函數 $\phi(-x) = -\phi(x)$ 或是偶函數 $\phi(-x) = \phi(x)$，不會有其他的狀況。

這樣的特例帶給我們以下計算上的簡化：一、解自動分為奇函數與偶函數兩組，都只要處理後從零到正無限大之間的範圍求解即可（因奇偶函數的另一半是確定的），另外，凡奇函數者皆可由初始原點以 $\phi(x=0) = 0$、$\phi'(x=0) = 1$ 作初始條件出發開始向右積分，而偶函數者皆可由初始原點以 $\phi(x=0) = 1$、$\phi'(x=0) = 0$ 作初始條件出發開始向右積分。

猜測本徵值

以下為程式流程概要：

(1) 使用者輸入位井深度 V_0 與寬度 2a，畫出位井的圖形

(2) 輸入猜測的 E 值，以及奇偶性

(3) 用演算法一步步積分波函數，並繪圖供觀察

(4) 清除畫面，重畫位井，重覆步驟 (2)

這個程式是供使用者不斷手工嘗試 E 值，找出量子力學允許的那些。

撰寫程式：

（請自行練習）

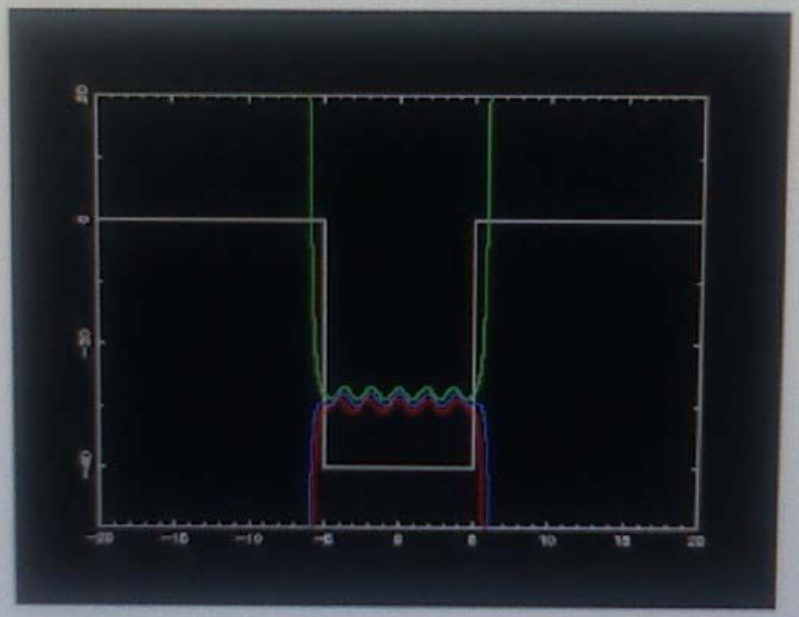
真的寫不出來，看看一下老師寫的範例程式

ViewSonic

撰寫程式：

（請自行練習）

真的寫不出來，偷看一下老師寫的範例程式



eigen.f

檔案(F) 編輯(E) 檢視(V) 我的最愛(A) 工具(T) 說明(H)

我的最愛 Google 網頁快訊圖庫

與時間無關的薛丁格方程式 — 束縛態的能階與波

網頁(P) 安全性(S) 工具(O)

操作

選 parity

選 eigenvalue (本徵值)

觀察與討論

一、為何向上或向下走後就一定是發散？（所以我們可以確定有一個解一定在向上與向下發散之間）

提示：從演算法的趨勢去看

二、給定一個位井，其所有可能的本徵值是有限個還是無限個？

三、換成拋物線型的位勢，其本徵值的分佈變成怎樣？

偷看一下：eigen parabolic.f

延伸思考

完成

開始 李明泰的個人資料 - 淡 與時間無關的薛丁格方

ViewSonic

提示：從演算法的趨勢去看

二、給定一個位井，其所有可能的本徵值是有限個還是無限個？

三、換成拋物線型的位勢，其本徵值的分佈變成怎樣？

偷看一下：eigen parabolic.f

延伸思考

在本單元中我們要一個一個猜能量值，雖然有向上、向下發散的提示作包夾，但實在還是太麻煩，有沒有自動的方法？

思考函數的求根問題（給我們一個明確的函數 f(x)，問那些 x 會使 f(x) = 0 ，我們怎麼作？）

解出來？

作圖？

用電腦地毯式搜索？

有演算法可用嗎？（二分法、牛頓法）