

電磁模擬：與時間有關的薛丁格方程式 - 波包

參考來源：本節取材自 Gould and Tobochnik 之 An Introduction to Computer Simulation Methods 一書，
程式則由李老師研究群從原來 TrueBASIC 語言改寫為 Fortran / PGPLT 版本。

時變性薛丁格方程（波包散射）

時變性的薛丁格方程式比非時變的困難得多，從初始時刻 $t = 0$ 開始，每推進一段微小的時間，就要解出整套波函數在空間中的分佈，更麻煩的是，這樣的多變動的解微方問題容易造成不穩定，根本上破壞了解的正確性。我們在這小節因此要學習很保守很穩定的方法，以便處理非時變性薛丁格方程式的積分求解問題。（像是參考書提到我們不應採用 (18.17) 式那種方式的演算法，而應採用 (18.18) 那樣的，細節請見原文）

Gould and Tobochnik 書中採用了另一種方法，它是把時變性波函數（一定有實部與虛部）的實部與虛部分開處理，從原本的薛丁格方程式（以下簡化為一維）

$$i\hbar d/dt \Psi(x,t) = \hbar^2/(2m) d^2/dx^2 \Psi(x,t) + V(x) \Psi(x,t)$$

寫成

$$\Psi(x,t) = R(x,t) + iI(x,t)$$

波函數拆分到處理

$$i\hbar dR/dt = H_{sp} R(x,t)$$

$$i\hbar dI/dt = -H_{sp} I(x,t)$$



我的網站

我的網站

我的網站

上一頁 | 下一頁 | 畫面尺寸 | 工具列 | 刪視窗

說明書 | 常用功能 | 資料夾 | 網頁快取結果 |

電磁學與時間有關的非線性方程求解 - 第四章

$I(x,t) = H_{op} R(x,t)$

如果在這裏使用半步法（中點法），這種演算法本來是要再多算中點斜率猜測值的（修過數值方法的同學可次回憶一下階躍巨庫增法的策略），但在這裏的狀況成了 $I(x,t)$ 是 $R(x,t)$ 的斜率、 $-R(x,t)$ 也是 $I(x,t)$ 的斜率，就可以安排成 $R(x,t)$ 永遠在格子點求值，而 $I(x,t)$ 永遠在中間點求值，如此就都不必多花額外的一倍算求中點斜率了，真的的演算法如下：

$$R(x,t + \Delta t) = R(x,t) + H_{op} I(x,t + \Delta t/2) \Delta t$$

$$I(x,t + (3/2)\Delta t) = I(x,t + \Delta t/2) - H_{op} R(x,t + \Delta t) \Delta t$$

在這種方式的表示下，概率密度 $P(x,t) = R(x,t)^2 + I(x,t)^2$ 仍可以用以下這種方式來表達

$$P(x,t) = R(x,t)^2 + I(x,t - \Delta t/2) I(x,t + \Delta t/2)$$

$$P(x,t + \Delta t/2) = R(x,t + \Delta t) R(x,t) + I(x,t + \Delta t/2)^2$$

Vinscher 證明上述演算法在滿足 $-2h/\Delta t < V < 2h/\Delta t - 2h^2/(m \Delta x)^2$ 這樣的 V 與 Δx 值是穩定的 [Ref. Computers in Physics 5(6), 596 (1991)]。

核心演算法摘要：

位勢的形式是以常數函式的方式寫之。

解微分方程一定需要初始值，初期的波包在此採用會給出常態分佈之概率密度者。其初速、波包大小（寬度）都可以直接在參數中調整。

在此初始值是一個波的空間分佈，採用高斯（即常態分佈）函數，注意波數（又叫波向量）也加進去影響其相位。實部與虛部都需要有初始值，它們各自在高斯分佈上有加上 \cos 波及 \sin 波，波的場有速度從那裏引入。本節所採用的演算法，虛部與實部差 $1/2 \Delta t$ ，因此它們的初始值也在不同的時刻定義故虛部就又多一個相位（詳見參考書籍或範例程式）。值得注書的一點是，而其概率分布看不到動量的物質波波長結構，恰好只呈現光滑的高斯分佈。

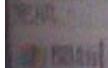
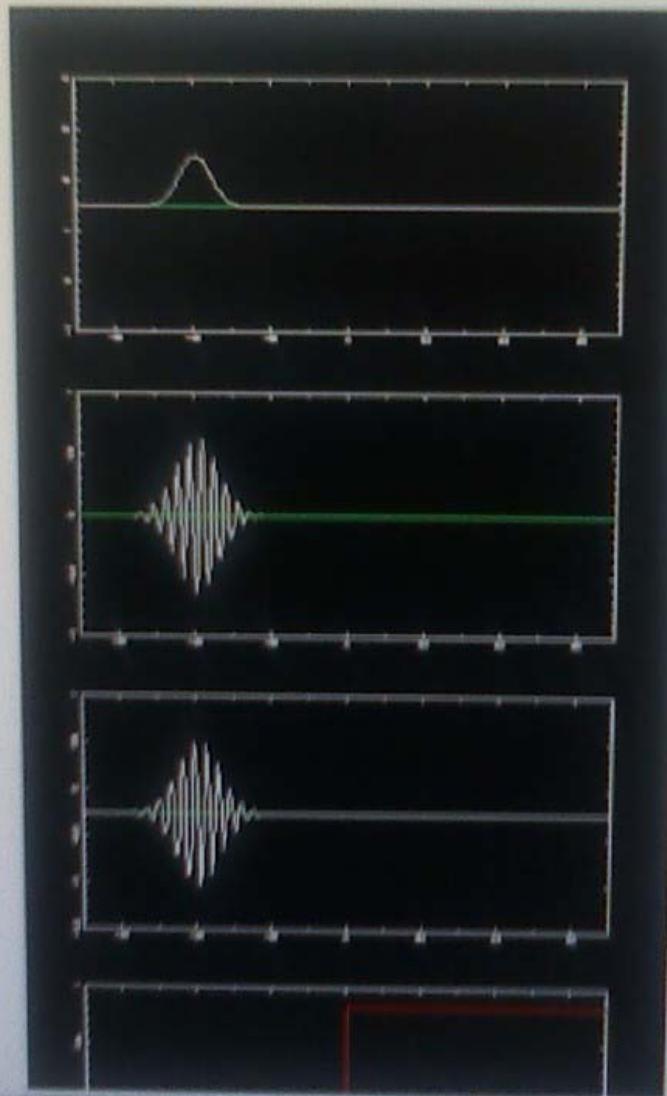
上一頁 下一頁 常用語彙(1) 工具(1) 說明(1)

教學

電場模擬：與時間有關的薛丁格方程式一 范例

前一頁 上一頁 下一頁 練習題(1) 安全性(1) 工具(1) 後一頁

等不及了？先偷看一下助教與老師寫的範例程式



李明豪的個人資料 - 次

電場模擬：與時間有關

網際網路

上一頁 下一頁

100%

http://163.13.111.54/high-school_math/TDSE_wave-packet.html

Live Search

我的最愛(0) 工具(0) 說明(0)

Google 網頁快訊圖庫

電磁模擬：與時間有關的薛丁格方程式一波包

程式內幾個與物理特性有關的參數

x_0 : 起始中心位置

k_0 : 初始波向量（正比於動量，也就是正比於速度）

width : 初始高斯函數（常態分佈）形之波包的寬度

Δx : 離散化後的空間間隔

Δt : 離散化後的時間間隔

v_0 : 位勢高度

a : 位井的半寬，但在階梯狀時是位壁的位置

x_{\max} : x 方向的右邊界

x_{\min} : x 方向的左邊界

操作、問題與討論

一、平坦位勢中的波包傳播

把位勢高度定為零。

網際網路 100%

新開... 編輯 (E) 設置 (U) 你的最愛 (F) 工具 (T) 說明 (H)

我的最愛 Google 網頁快訊圖庫

電磁模擬：與時間有關的薛丁格方程式－波包

前一頁 上一頁 下一頁 下一頁 檢查 (F5) 網頁 (H) 安全性 (S) 正向 (B)

一、平坦位勢中的波包傳播

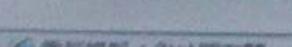
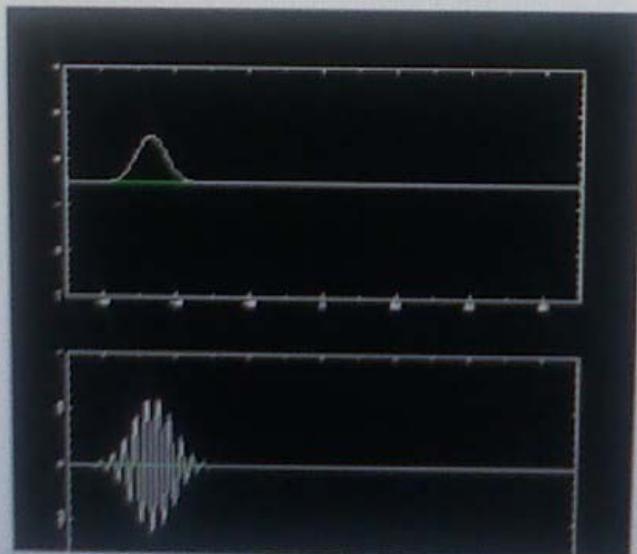
把位勢高度定為零。

二、對向階梯狀的位勢

觀察透射及反射。

三、透射位壘

改造位勢函數，使其能處理位壘（即平坦區域中間有一高度自定的突出）。



我的最愛 Google 網頁快訊圖庫

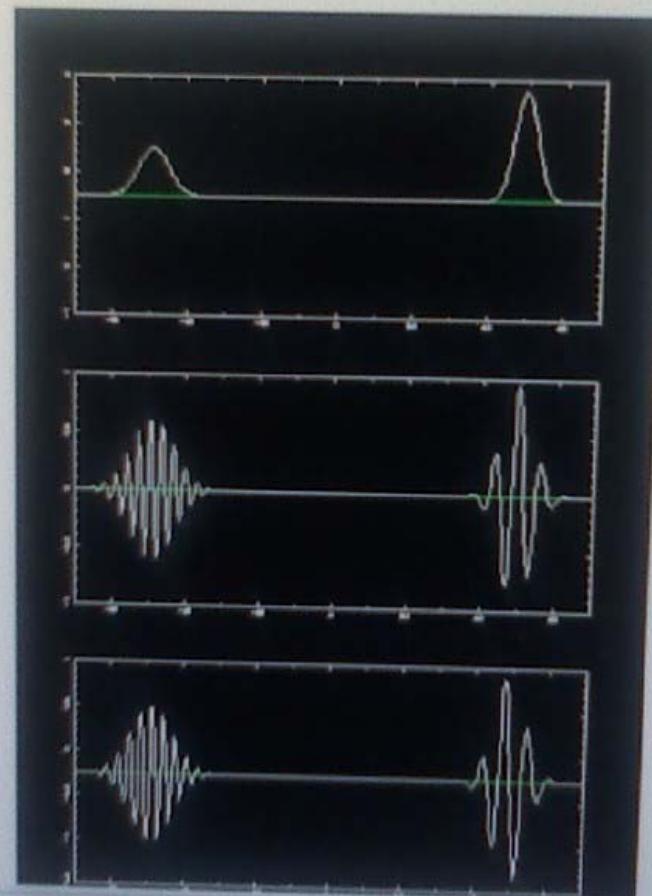
電腦模擬：與時間有關的薛丁格方程式—波包

前一頁 上一頁 下一頁 次一頁 網頁(Alt+F3) 安全度(Alt+F4) 工具(Alt+F5)

五、兩個波包迎面對撞（波包對撞機）

請自行加入另一個波包（在波包初始化的副程式中修改），觀察對撞。

自己試試看波包對撞，不成功再參考



系統



李明睿的個人資料 - 次

電腦模擬：與時間有關

網址地點

上一頁 下一頁 次一頁

