電腦模擬：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True BASC 語言改寫為 Fortran / PGPLOT 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 = t0 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，這樣的多變數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（以下簡化爲一維）

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

再令

$$\Psi(x,t) = R(x,t) + i\, I(x,t)$$

拆開成兩組分別處理

$$d/dt\ R(x,t) = H_{op}\ I(x,t)$$

$$d/dt\ I(x,t) = -\ H_{op}\ R(x,t)$$

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想一下階隆巨庫塔法的策略），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，具的的演算法如下：

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

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

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

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

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

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

核心演算法提要：

位勢的形式是以定義函式的方法爲之。

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

位勢的形式是以定義函式的方法寫之。

解微分方程一定需要初始值，初始的波包在此採用會給出常態分佈之機率密度者。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。實部與虛部都需要初始值，它們各自在高斯分佈上有套上 cos 波及 sin 波，波的群速度從那裏引入。本節所採用的演算法，虛部與實部差 1/2 Δt，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）。值得注意的一點是，而其機率分佈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。

請注意這裏有時間、空間兩個變數，都有被離散化，但在此只有時間是需要做微步推進 Δt 的，Hamiltonian 算符中包含了對空間的二次微分，在那裏相鄰近的空間座標格子間的（波）函數值是有一起作些運算，但不同空間的波函數不是從，而是一開始就給了分佈在整個空間（即空間中處處有定義）的波函數作爲初始條件。

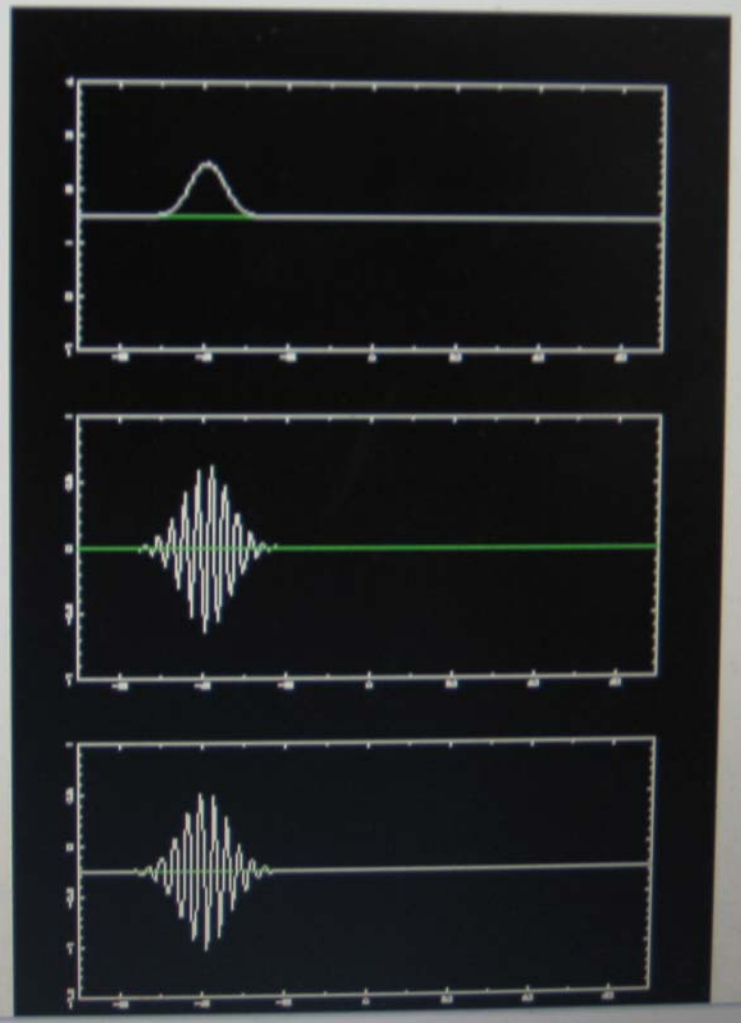
寫程式

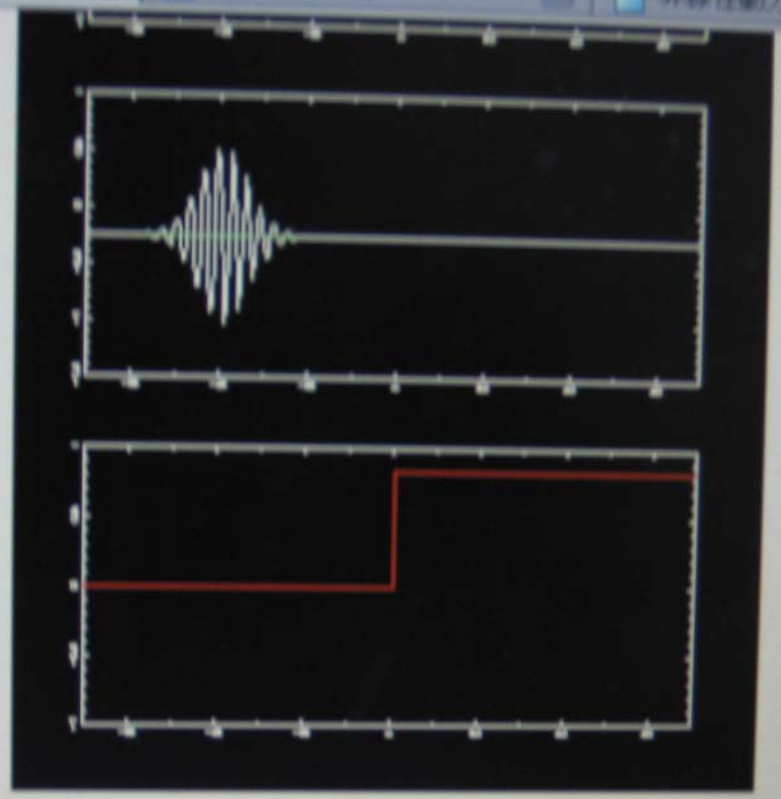
等不及了？先偷看一下助教與老師寫的範例程式

http://boson4.phys.tku.edu.tw/high-school_math/TDSE_wave-packet.html

撰寫程式

等不及了？先偷看一下助教與老師寫的範例程式





tdse.f

在程式內幾個與物理特性有關的參數

x0：起始中心位置

k0：初始波向量（正比於動量，也就是正比於速度）

k0：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

dx：離散化後的空間間隔

dt：離散化後的時間間隔

V0：位勢高度

a：位井的半寬，但在階梯狀時是位壁的位置

xmax：x 方向的右邊界

xmin：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

把位勢高度定爲零。

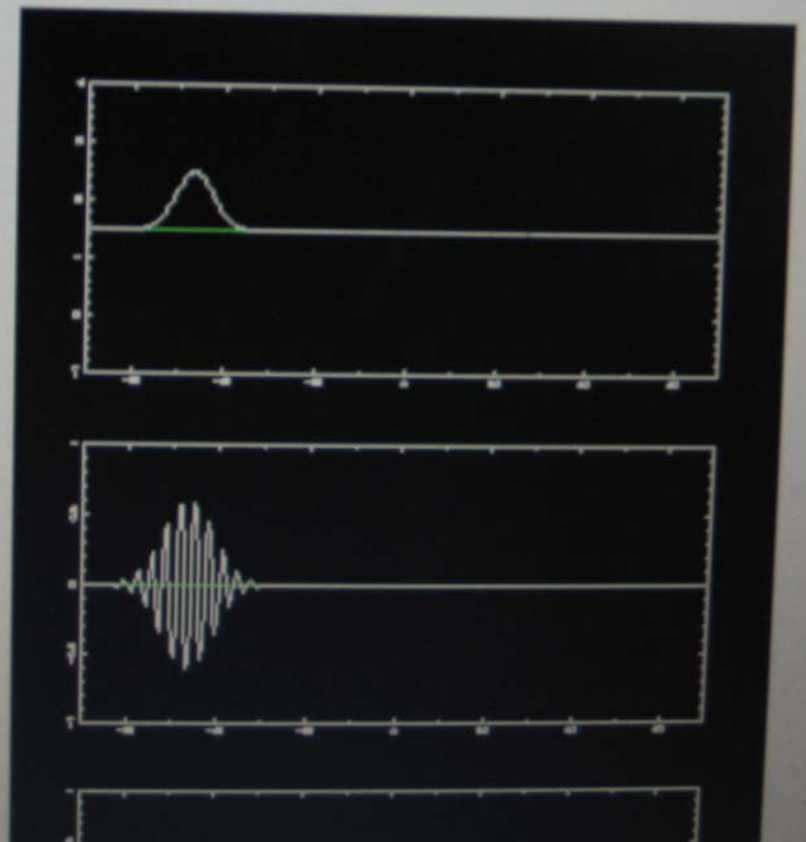
二、射向階梯狀的位勢

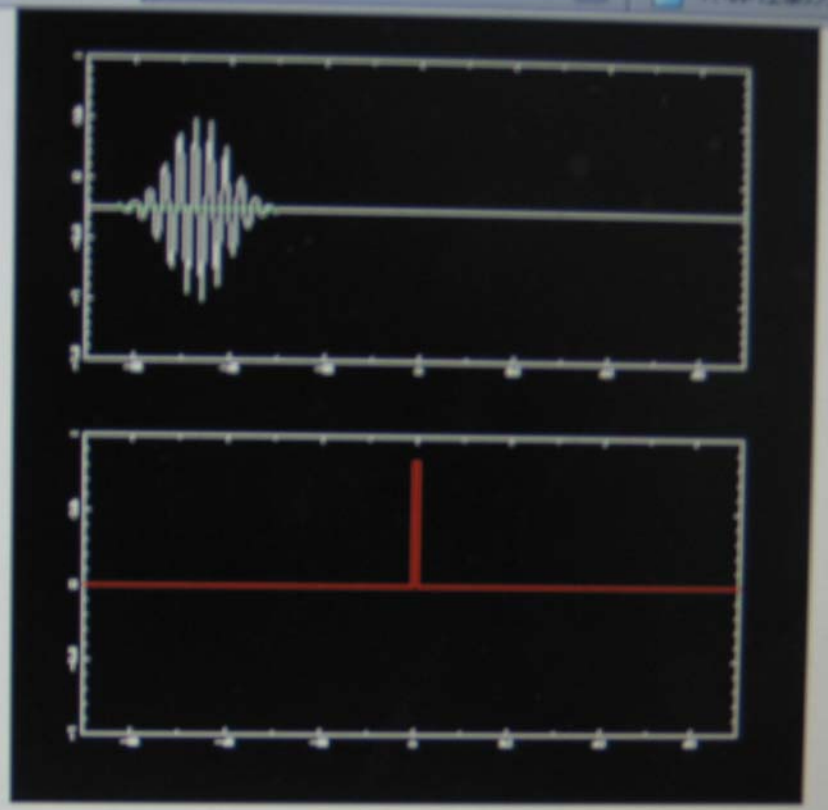
二、射向階梯狀的位勢

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）。





tdse_3.f

四、在無限深位井內的演進

五、兩個波包迎面對撞（波包對撞機）

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