

# 计算物理作业-4

Spring 2026

课程内容: 经典数值计算

上交方式: 上传至“学在浙大”

开始时间: 2026/03/13

截止时间: 2026/03/20, 24:00

## 1. 由离散势能数据重建双原子分子的势能曲线

在原子分子物理和量子化学中, 双原子分子的相互作用势能  $V(r)$  往往只能在若干离散核间距  $r$  处通过实验或数值计算获得。为了进一步分析平衡键长、势阱深度以及小振动频率, 需要将这些离散数据重建为连续函数。这正是插值方法的典型应用场景。

设某双原子分子的核间距  $r$  与势能  $V(r)$  的离散数据如下:

$r / \text{\AA}$	0.90	1.05	1.20	1.35	1.50	1.65	1.80	2.00	2.30
$V(r) / \text{eV}$	1.84	0.43	-0.64	-1.28	-1.50	-1.36	-1.04	-0.64	-0.28

那么请完成:

(a) 用 Python 读入上述数据, 并画出离散数据散点图, 分别采用拉格朗日插值和三次样条插值来重建连续势能曲线, 在足够密的  $r$  网格上绘制两种插值结果, 并与原始数据点同时显示。

(b) 确定其平衡位置  $r_e$ , 并且在平衡位置附近, 用数值微分或三次样条导数估计二阶导数

$$k = \left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_e},$$

这即是分子小振动近似下的有效弹性系数。

## 2. 放射性衰变数据的最小二乘拟合

放射性衰变是最典型的指数衰减过程之一。若考虑环境本底计数, 探测器记录到的总计数率可写为

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} + B,$$

其中  $N_0$  为初始净计数,  $\lambda$  为衰变常数,  $B$  为本底计数。实验中常常测得一组离散时间点上的计数数据, 需要通过拟合来提取  $\lambda$ 、 $N_0$  和  $B$ 。

现给出如下实验数据:

$t / \text{s}$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110
$N / \text{counts}$	1036	819	640	514	397	327	257	208	165	140	117	101

把计数误差近似看作泊松分布，可取

$$\sigma_i \approx \sqrt{N_i},$$

那么请完成：

- (a) 用 Python 读入数据并作散点图，需要加上误差。
- (b) 采用带误差的最小二乘法拟合（可以使用 `scipy.optimize.curve_fit`）

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} + B.$$

给出拟合得到的参数  $N_0$ 、 $\lambda$  和  $B$ ，并根据拟合结果计算半衰期

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

- (c) 给出参数误差估计，并由误差传播公式估计半衰期的不确定度。