

计算物理导论 - Homework 4 : 薛定谔方程

A. 非简谐振子

求解定态薛定谔方程

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \phi(x) = E \phi(x).$$

其中势能选取

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{10}x^4.$$

1. 如何数值求解这个问题？简述你使用的方法，并数值实现。(1.5分)
2. 求解基态波函数和基态能量。画出基态波函数绝对值的图像（要正确归一化）。写出基态能量（精确到 1×10^{-4} ），下同。(1分)
3. 求解第 1-4 激发态的本征能量和波函数。(1分)
4. 和简谐振子($V = \frac{1}{2}x^2$)的情况（存在解析解）对比，你发现了什么差异？(1分)
5. 你能想出和（1）中使用的方法不同的别的方法求解上述问题吗？这（些）方法相比（1）中的有什么优缺点？（0.5分）（简述即可，但鼓励动手实现）

B. 格点上的单粒子动力学

求解一维格点系统中的单粒子薛定谔方程：

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t), \quad H = - \sum_{i=1}^L (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c.).$$

晶格具有周期边界条件。数值求解时刻 t 的波函数 $\psi(t) \equiv [\psi_1(t), \psi_2(t), \dots, \psi_L(t)]^T$. 初始的时候粒子处于第 i_0 格点，即

$$\psi_i(t=0) = \delta(i - i_0).$$

取 $L = 200, i_0 = 100$ 。求解时间范围 $t \in [0, 50]$ 。

1. 具体求解时间 $t = 1, 10, 20, 50$ 几个时刻的波函数，画出粒子密度分布 $\rho_i(t) \equiv |\psi_i(t)|^2$ （横轴为格点标号 i ）。(1分)
2. 画出求解时间范围内的波包宽度 $w(t)$ 随着时间的变化情况。(1分) 波包宽度定义为

$$w(t) = \sqrt{\sum_i (i - i_0)^2 \rho_i(t)}.$$

3. 画出求解时间范围内起始点粒子密度 $\rho_{i_0}(t)$ 随着时间的变化情况。(1分)
4. 尝试使用量子力学解释你在前三个图像中所看到现象（2分） hint: 你可以考虑 $L \rightarrow \infty$ 的极限。