

HOMEWORK4:薛定谔方程

A.非简谐振子

1.数值求解方法

此题为边界问题，要求满足在边界处：

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x, t) = 0$$

此外，还要保证波函数的归一化

为了数值求解，不妨认为存在 L 足够大，使得：

$$\phi(L, t) \approx 0$$

和

$$\phi(-L, t) \approx 0$$

其中 L 足够大以覆盖波函数的主要分布范围。

这是一个本征值问题：只有当 E 是某些特殊值（本征值）时，这个边值问题才有非零的解（波函数）。

所以，我们可以使用基于割线法和龙格库塔法结合（打靶法）的思想解决问题：

1. 首先要利用量子力学的一个结论，对于势函数为偶函数的情况下，基函数、偶数级激发态的波函数为偶函数，奇数级激发态为奇函数。
2. 将问题转化为初值问题
猜测一个 E 的值，我们可以设置初值条件
 - 基态或者偶数级激发态： $\psi(0) = 1$ （或其他非零值，数值计算时不影响归一化）和 $\psi'(0) = 0$ 。
 - 奇数级激发态： $\psi(0) = 0$ 和 $\psi'(0) = 1$ （或其他非零值，数值计算时不影响归一化）
3. 使用数值方法（四阶龙格-库塔法）从 $x = 0$ 积分到 $x = L$ 。
4. 检查边界 $\psi(L)$ 是否接近零。如果结果不满足边界条件，使用割线法调整 E 的值。定义 $f(E) = \psi(L)$ ，则

$$E_{n+1} = E_n - \frac{E_n - E_{n+1}}{f(E_n) - f(E_{n-1})} f(E_n)$$

5. 对于新的E的值，回到步骤2，如此迭代，直到满足边界条件
6. 最后，对于找到的E，得出波函数，对波函数进行归一化处理。

写出相关代码进行数值计算，其中用到的割线法和龙格库塔法已在前面的作业中写过。
具体代码实现详见附录。

2. 计算基态能量

设置 $x=0$ 处的波函数为1，波函数的导数为0，令其满足边界条件： $x=L$ 处的波函数为0，得到基态能量为0.2：

```
ground state energy:0.2
```