

Все задания (с постановкой задачи, пояснениями и комментариями) необходимо делать в Jupyter Notebook.

**Задание.** Решить задачу для стационарного уравнения Шредингера с помощью вариационного метода, используя указанные в варианте пробные функции.

Сравнить энергии основного состояния, полученные с помощью разных пробных функций. Указать, какие функции дают более точный результат. Для обеих функций построить графики волновых функций основного состояния.

Для второй пробной функции на графике потенциала построить полученные уровни энергии, а также волновые функции основного, первого и второго возбужденных состояний.

*Вариант 1.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad 0 < x < +\infty,$$

$$V(x) = x^3,$$

$$\psi \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0, \quad \psi(0) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = x \exp(-ax).$

2)  $\varphi_k(x) = P_{2k+1}(x) \exp(-x), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$  (Полиномы Лежандра)

*Вариант 2.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < 0,$$

$$V(x) = x^4,$$

$$\psi \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0, \quad \psi(0) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = x \exp\left(\frac{x}{a}\right).$

2)  $\varphi_k(x) = T_{2k+1}(x) \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$  (Полиномы Чебышева)

*Вариант 3.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -1 < x < 1,$$

$$V(x) = x^2 - 1,$$

$$\psi(-1) = \psi(1) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = \sin \frac{\pi(x-1)}{2} \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = x^k (1 - x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$

*Вариант 4.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < +\infty,$$

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}},$$

$$\psi \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

1)  $\varphi(x) = \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = x^k \exp(-|x|), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$

*Вариант 5.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad 0 < x < +\infty,$$

$$V(x) = x - 1,$$

$$\psi \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0, \quad \psi(0) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = x \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = P_{2k+1}(x) \exp(-x), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$  (Полиномы Лежандра)

*Вариант 6.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -1 < x < 1,$$

$$V(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}},$$

$$\psi(-1) = \psi(1) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = (1 - x^2) \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = x^k \sin \frac{\pi(x-1)}{2}, \quad k = 0, 1, \dots, 9.$

*Вариант 7.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < 0,$$

$$V(x) = -x - 1,$$

$$\psi \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0, \quad \psi(0) = 0.$$

1)  $\varphi(x) = x \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = P_{2k+1}(x) \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$  (Полиномы Лежандра)

*Вариант 8.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < +\infty,$$

$$V(x) = |x|,$$

$$\psi \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

$$1) \quad \varphi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{a}\right).$$

$$2) \quad \varphi_k(x) = P_k(x) \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9. \text{ (Полиномы Лежандра)}$$

*Вариант 9.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < +\infty,$$

$$V(x) = -\exp(-x^2),$$

$$\psi \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

$$1) \quad \varphi(x) = \exp(-2a|x|).$$

$$2) \quad \varphi_k(x) = T_k(x) \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9. \text{ (Полиномы Чебышева)}$$

*Вариант 10.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < +\infty,$$

$$V(x) = -\exp(-|x|),$$

$$\psi \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

$$1) \quad \varphi(x) = \exp(-ax^2).$$

$$2) \quad \varphi_k(x) = L_k(x) \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9. \text{ (Полиномы Лагерра)}$$

*Вариант 11.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -1 < x < 1,$$

$$V(x) = x^4 - 1,$$

$$\psi(-1) = \psi(1) = 0.$$

$$1) \quad \varphi(x) = (1 - x^2) \exp(-ax^2).$$

$$2) \quad \varphi_k(x) = P_k(x) \sin \frac{\pi(x-1)}{2}, \quad k = 0, 1, \dots, 9.$$

*Вариант 12.*

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi, \quad -\infty < x < +\infty,$$

$$V(x) = x^2,$$

$$\psi \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

1)  $\varphi(x) = \exp(-ax^2).$

2)  $\varphi_k(x) = x^k \exp(-x^2), \quad k = 0, 1, \dots, 9.$