目的 $\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{x})\}\psi=E\psi$

有限差分方法：简单直观.

要求：求解：1d, 2d Schrödinger eq.

$d=3 \Rightarrow N^3$

⇒ ① 无量纲化.

② $[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)]\psi(x)=E\psi(x)$.

$$\psi'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{\psi(x+h)-\psi(x)}{h}.$$

$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2}(\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i)+V(x_i)\psi_i=E\psi_i$.

⇒ h有限. 代替 $\psi'(x)$.

其中 $\psi_i=\psi(x_i)$

$$\begin{cases}\psi'(x)\simeq\frac{\psi(x+h)-\psi(x)}{h}+O(h^2)\\ \psi''(x)=\frac{\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)}{h^2}\end{cases}$$

三对角阵：

$$H=-\frac{1}{2h^2}\begin{pmatrix}-2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots\end{pmatrix}_{N\times N}+\begin{pmatrix}V(x_1) & & \\ & \ddots & \\ & & V(x_n)\end{pmatrix}_{N\times N}.$$

特点 (1d)

1) 稀疏矩阵, 三对角阵, $O(N^2)$

2) N非常大. $h=L/N\to 0$

问：$H=\lambda T+V$

$$\begin{cases}\lambda\to\infty\\ N\to\infty.\\ \quad\frac{1}{\sqrt{\lambda}}.\end{cases}$$

作业：

1) $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$, $m=1$, 比对解析结果与数值计算的结果. 体会误差的来源. 大小, 以及误差与 L, N, h 的关系. $h=L/N$. $h=10^{-3}\sim10^{-4}$. 保证计算精度.

2) $\frac{1}{2}m\omega^2x^2+A\cos(kx+\theta)=V(x)$

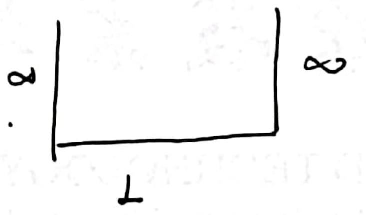
① 数值求解.

② 微扰计算. mma. 算到二阶.

☆数值计算时，结果要与微扰论结果对照.

☆代码要保存，考试要用到.

考虑无穷深势阱：



$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \qquad \psi \propto \sin(kx)$$

$$\begin{cases} \psi(0)=\psi(L)=0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \frac{k^2}{2}=E \\ kL=n\pi \end{cases} \Rightarrow E=\frac{n^2\pi^2}{2L^2}$$

$$H=-\frac{1}{2h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \end{pmatrix} \qquad \lim_{h\to 0} E_n(h)=\frac{n^2\pi^2}{2L^2}.$$

$$-\frac{1}{2h^2}(\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i)=E\psi_i.$$

☆解是什么样子？

类似于 $a_{n+1}=xa_n+ya_{n-1}$. $q^2=xq+y$ . . .

求解：$-\frac{1}{2h^2}(\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i)=E\psi_i$.

令 $\psi_i \propto e^{\overset{\sqrt{-1}}{i}khi}$

$$-\frac{1}{2h^2}(e^{ikh}+e^{-ikh}-2)=E$$

$$E=\frac{1}{2h^2}(2-2\cos kh)=\frac{1}{h^2}(1-\cos kh)=\frac{1}{2}k^2.$$

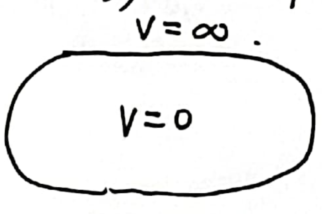
边界条件：$\psi_n=C_+e^{ikhn}+C_-e^{-ikhn}$

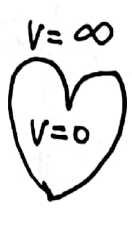
$$\begin{cases} -2\psi_1+\psi_2=E\psi_1 \\ \psi_{n-1}-2\psi_N=E\psi_N \end{cases}$$

代入求解 k.

2D推广.

作业：3) 求两个势的本征态. 4) $V_{ij}=\begin{cases} U & \text{大一点的值.} \\ 0 & \end{cases}$





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

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{h^2}(\psi_{i+1\,j}+\psi_{i-1\,j}-2\psi_{ij})+\frac{1}{h^2}(\psi_{i\,j+1}+\psi_{i\,j-1}-2\psi_{ij})\right]+V_{ij}\psi_{ij}=E\psi_{ij}$$

$$=-\frac{1}{2h^2}\left[(\psi_{i+1\,j}+\psi_{i-1\,j}+\psi_{i\,j+1}+\psi_{i\,j-1})-4\psi_{ij}\right]+V_{ij}\psi_{ij}=E\psi_{ij}.$$

2d 特点：

1) 稀疏矩阵. 非三对角阵.

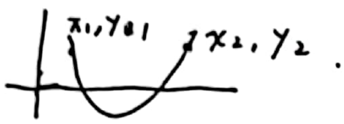
2) $N^2\times N^2$ 量级. $O(N^6)$.

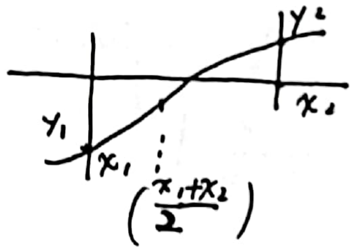
$$\psi=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}\begin{array}{l} \to 第一列 \\ \to 第二列 \\ \\ N^2. \end{array}$$

求根.（例如. 二分法）

$y_1y_2<0$

$y_1y_2>0$





对于有多个根的情况，间隔尺寸多小，就可以找出.

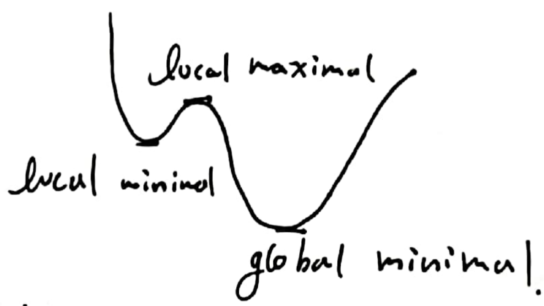
x_0+nh.

牛顿法.

思想：求根.

极值.

$F(\vec{x})$ 极值. $f_i=\frac{\partial F}{\partial x_i}=0$.



求某个函数的极值等价于求另一个函数的根.

牛顿法、

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0$$

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}}$$ 牛顿迭代公式.

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x^* \Leftrightarrow x^* = x^* - \frac{f(x^*)}{f'(x^*)} \Leftrightarrow f(x^*) = 0.$$

训练一：$x_{n+1} = x_n - p\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$.

推广高维：$f(\vec{x}) = f(\vec{x}_0) + \dfrac{\partial f}{\partial x}(x^i - x_0^i) = 0$

$$\vec{x} = \vec{x}_0 + (\cdots)$$

求解：$y' = f(x, y)$

$$\frac{\partial}{\partial t} u = a^2 \nabla^2 u.$$

核心1：Runge-kutta 方法．积分器．$y'(x) = f(x)$ $y = \int_0^x f(x)dx$.

mathematica．~~Dst~~, Dsolve

NDSolve.

matlab ode 一个程序.

程序 ode45．f90．1400行.

$y' = f(x, y)$

$y(x_{n+1}) = y(x_n) + f(x_n, y_n)h$. $y_{n+1} = y_n + f(y_n)h$.

$\to y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$ 隐式 / 自洽法.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n) + \frac{h}{2} f(x_{n+1}, y_n + h f(x_n, y_n))$$

runge-kutta 方法.

$\sim O(h^5)$