WUHAN
UNIVERSITY

自强 弘毅
求是 拓新

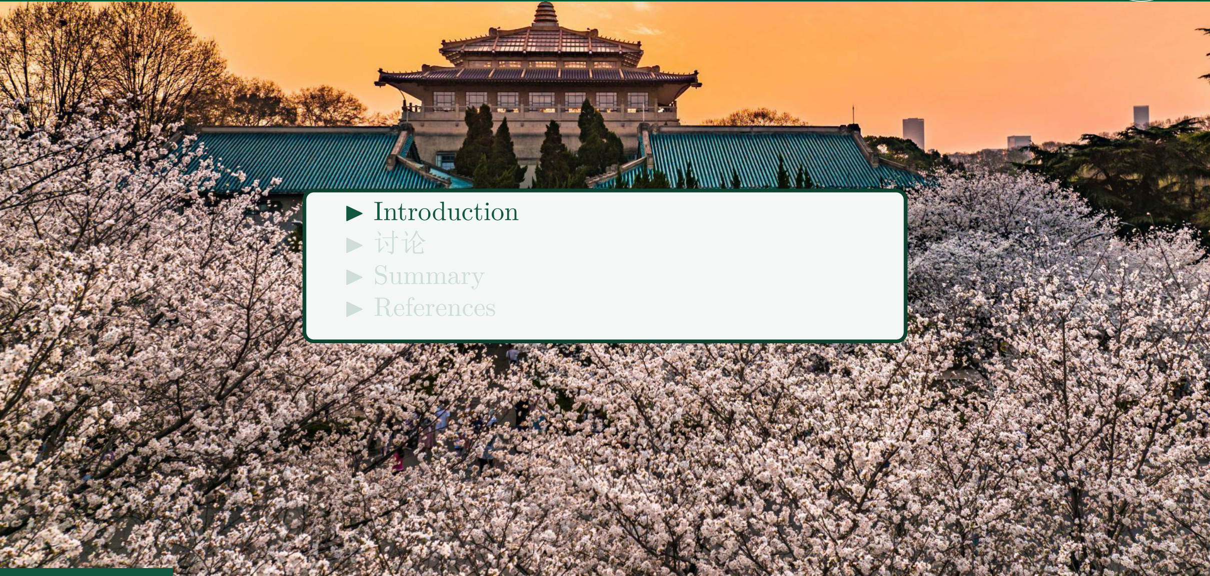
presentation

A Subtitle

your name
School of Physics, WHU

2025 年 3 月 18 日

Contents



Acknowledgement

- 本模板为非官方模板，根据中国科学院大学Jonathan Lin[1] 制作模板修改。校徽校训等来自武大官网。修改了目录页背景的一些 bug，增加了中文支持，添加了 `physics` 等宏包和例子；
- 请勿用于商业用途！！

公式和表格

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} v_{11} & -\delta^2 & \cdots & -\delta^2 & \cdots & 0 \\ -\delta^2 & v_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\delta^2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & -\delta^2 & v_{LK} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} g(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x,0) e^{-ikx} \, \mathrm{d}dx \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{-i(k-k_0)x} \mathrm{d}x \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{1}{(2\sigma)^2}(x+2i(k-k_0)\sigma^2)^2 - (k-k_0)^2\sigma^2} \, \mathrm{d}x \end{aligned} \tag{1}$$

公式1是一个多行公式的例子。

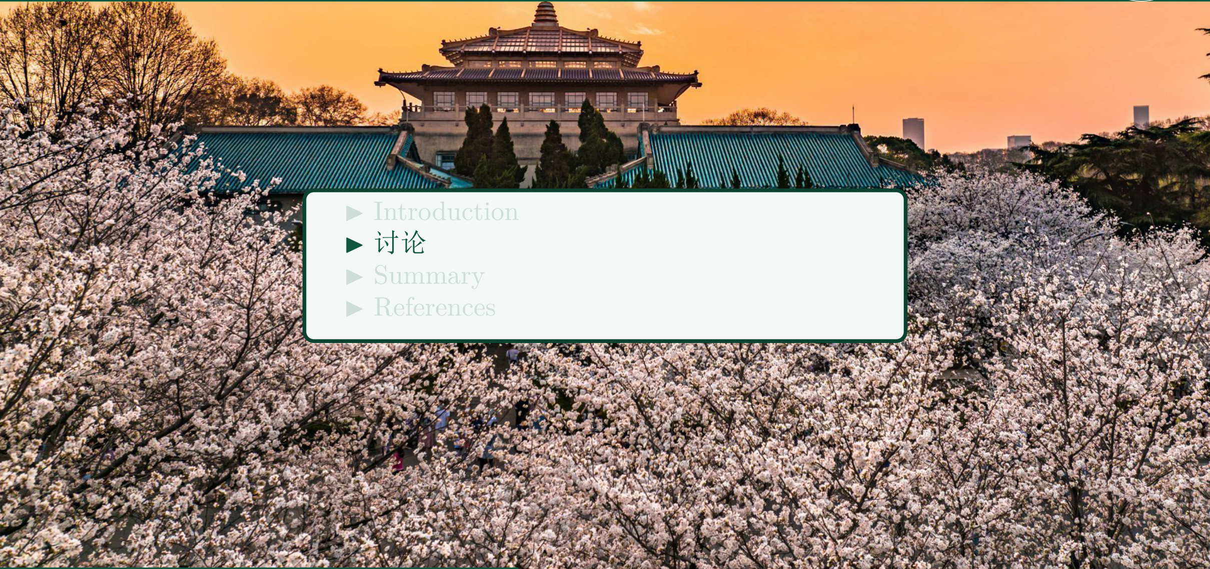
表格的例子

原子单位制	
质量	$m_e = 9.1094 \times 10^{-31} kg$
电荷	$e = 1.6022 \times 10^{-19} C$
角动量	$\hbar = 1.0546 \times 10^{-43} J \cdot s$
介电常数	$4\pi\varepsilon_0 = 1.1127 \times 10^{-10} F \cdot m^{-1}$
长度	$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5.2918 \times 10^{-11} m$
能量	$Hartree = \frac{m_e e^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar} = 4.3597 \times 10^{-18} J$

图: 武大旧景

verb 不能出现在\macro 中，例如\section. 需要 [fragile]，或者\cprotect

Contents



非正交基组

- 通过交叠矩阵的逆矩阵定义非正交基组 $|\phi_i\rangle$ 的对偶基组 $|\phi^k\rangle$:

$$|\phi^k\rangle = \sum_i S_{ik}^{-1} |\phi_i\rangle \tag{2}$$

- 运算规则:

$$\begin{gathered} \langle\phi_j|\phi_k\rangle = S_{jk} \\ \langle\phi_j|\phi^k\rangle = \delta_{jk} \\ \langle\phi^j|\phi^k\rangle = S_{jk}^{-1} \\ \hat{\mathbf{I}} = \sum_k |\phi^k\rangle\langle\phi_k| = \sum_k |\phi_k\rangle\langle\phi^k| \end{gathered} \tag{3}$$

切比雪夫多项式

为了演化波函数，需要对时间演化算子进行数值展开，由于哈密顿量是稀疏的，所以可以方便地使用 Chebyshev 多项式进行展开，这种方法对求解含时薛定谔方程是无条件稳定的。假设 $x \in [-1, 1]$，

$$e^{-izx} = J_0(z) + 2\sum_{m=1}^{\infty}(-i)^m J_m(z) T_m(x) \tag{4}$$

其中 J_m 是 m 阶贝塞尔函数，T_m 是第一类切比雪夫多项式。$T_m(x)$ 可以由递归关系求解：

$$T_{m+1}(x) = 2xT_m - T_{m-1} \tag{5}$$

为了利用切比雪夫多项式方法，我们需要将 $\hat{H}$ 缩放为 $\tilde{H} = \hat{H}\|H\|$，使 $\tilde{H}$ 的特征值分布在 $[-1, 1]$。

$$|\varphi(t)\rangle = \{J_0(\tau) + 2\sum_{m=1}^{\infty}(-i)^m J_m(\tau)\hat{T}_m(\tilde{H})\}|\varphi(0)\rangle \tag{6}$$

$\tau = t \cdot \|H\|$。

代码的例子

```
#include<H5Cpp>
H5::H5File file(filename, H5F_ACC_RDONLY, H5::FileCreatPropList::DEFAULT, fapl);
H5::Group group = file.openGroup(group_name);
H5::DataSet dataset = group.openDataSet(dataset_name);
H5::DataSpace filespace = dataset.getSpace();
```

```
#include<hdf5>
hid_t plist_id = H5Pcreate(H5P_FILE_ACCESS);
H5Pset_fapl_mpio(plist_id, MPI_COMM_WORLD, MPI_INFO_NULL);
hid_t file_id = H5Fopen(filename.c_str(), H5F_ACC_RDONLY, plist_id);
H5Pclose(plist_id);
hid_t group_id = H5Gopen(file_id, groupname.c_str(), H5P_DEFAULT);
hid_t dataset_id = H5Dopen(group_id, dataset_name.str().c_str(), H5P_DEFAULT);
```

Splitting in Columns

简单的分栏的例子, 注意`textwidth` 的变化:

Contents

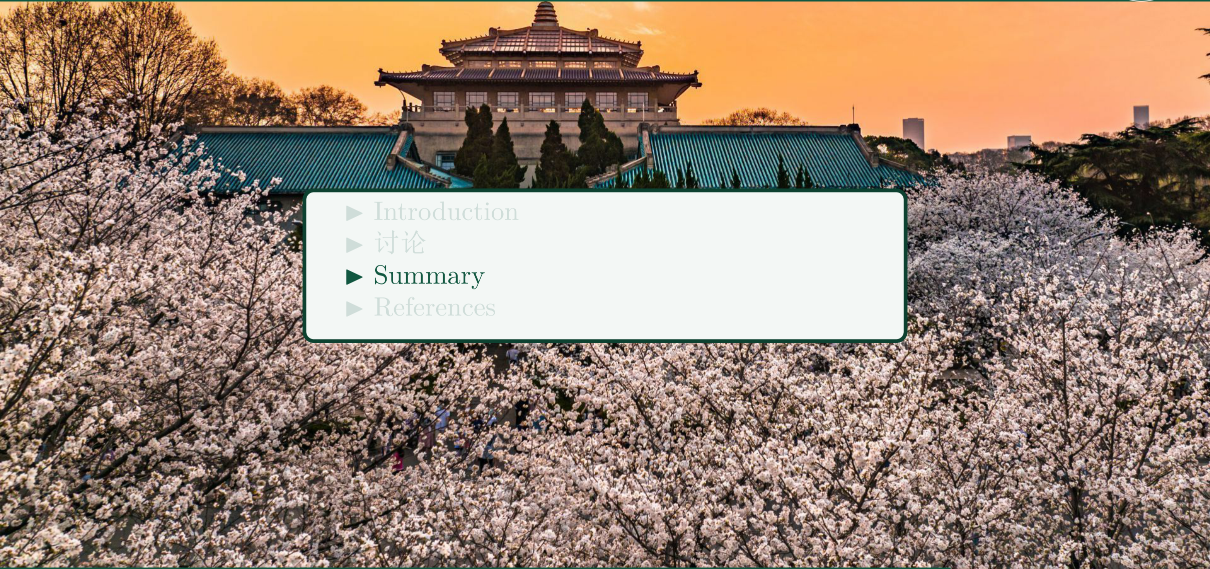
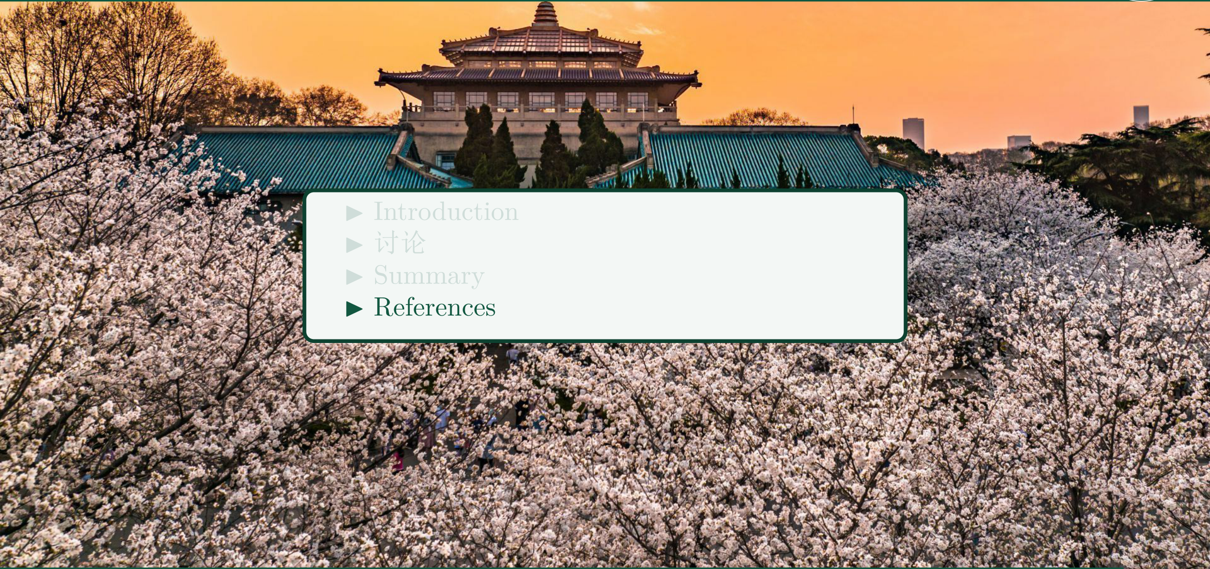


图: 樱顶的夜空

- 没有标题的页面。
- 一份简短的入门，涵盖了公式、代码、分栏、表格、图片、参考文献 [2]。
- Good Luck

Contents



References

[1] J. Lin, [Online]. Available: https://cn.overleaf.com/project/67d429aed396086bd4f730ff.

[2] 作者, 标题, 编辑, Ed. 出版社, 2025.