

# 1D+2D定态薛定谔方程

SA22234036 肖添宁

## ■ 一维定态薛定谔方程

我们在坐标表象下进行定态方程的计算：

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \xrightarrow{\text{坐标表象}} \langle r|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle r|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r)$$

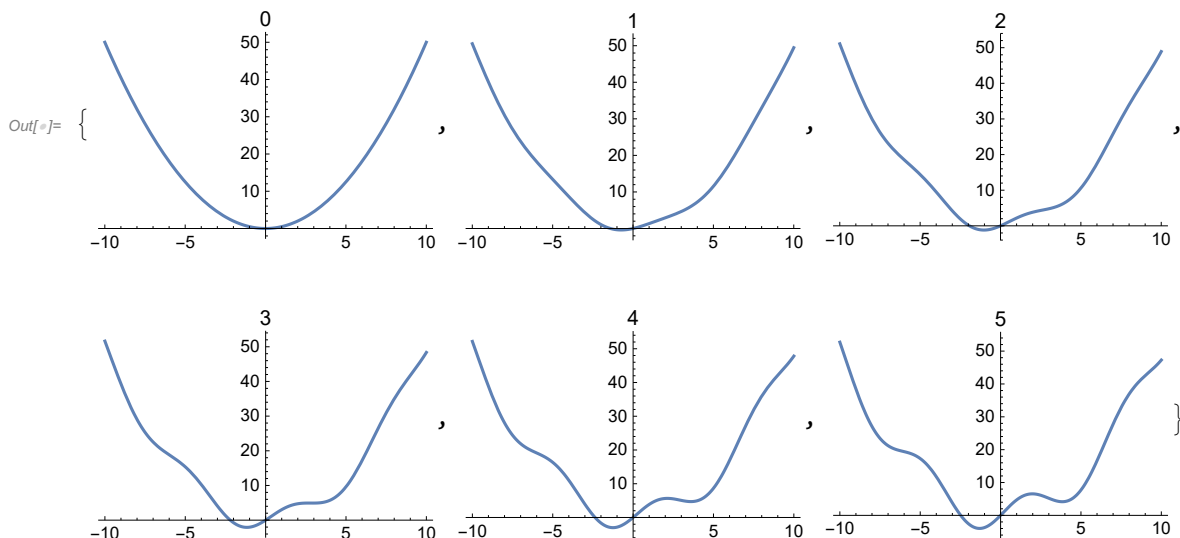
$$\Rightarrow \frac{1}{2m} \langle r|\hat{p}^2|\psi\rangle + V(r)\langle r|\psi\rangle = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r) = E \psi(r)$$

其中一维的势能设为：

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

为了简便，我们设  $m=\hbar=\omega=k=1$ ，由此可以看一下势能在不同A下的大致图像：

`In[ ]:= Table[Plot[ $\frac{1}{2} x^2 + a * \text{Sin}[x]$ , {x, -10, 10}, PlotLabel -> a], {a, 0, 5, 1}]`  
[表格] [绘图] [正弦] [绘图标签]



之后进行动能和势能的离散化： $\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right]$

(a) 动能的离散化：

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \sim -\frac{1}{2} \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} \sim -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

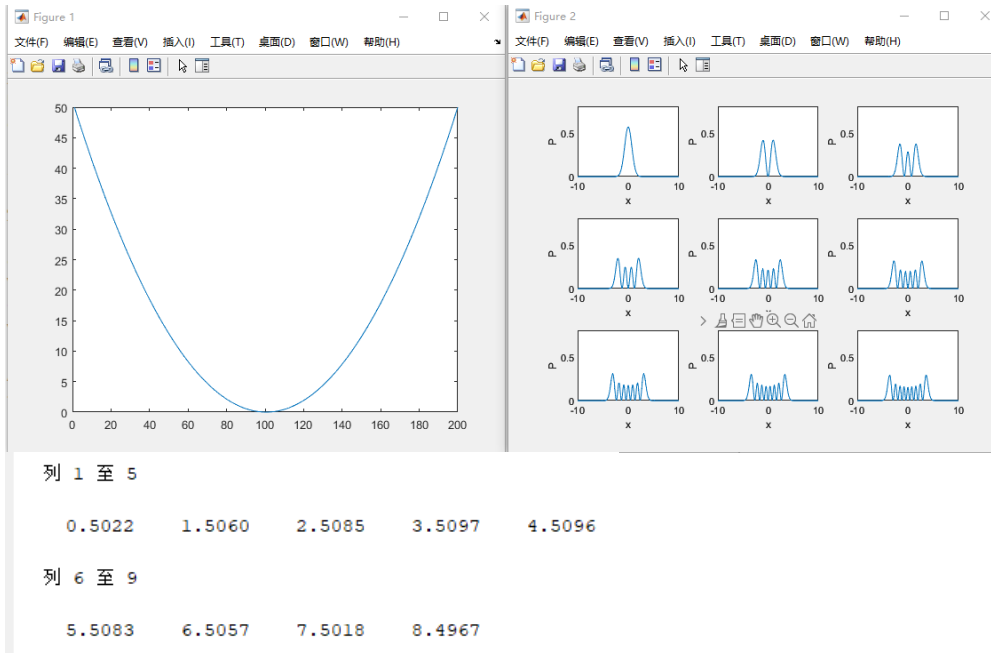
(b)势能的离散化：

$$V(x) \sim V_i(x) \psi_i \sim \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

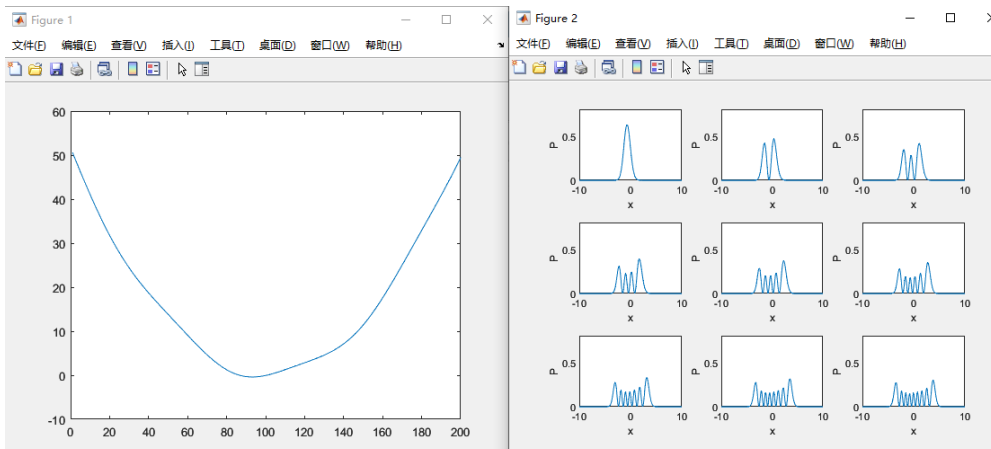
由此进行算符矩阵的构建。求得矩阵本征值和本征向量，从而得到本征能量和本征波函数。

下面展示，从a取0到5间隔为1的能量本征值和波函数模方的结果(从左到右分别是势场 $V(x)$ 、波函数和基态附近的能量本征值)：

a=0



a=1



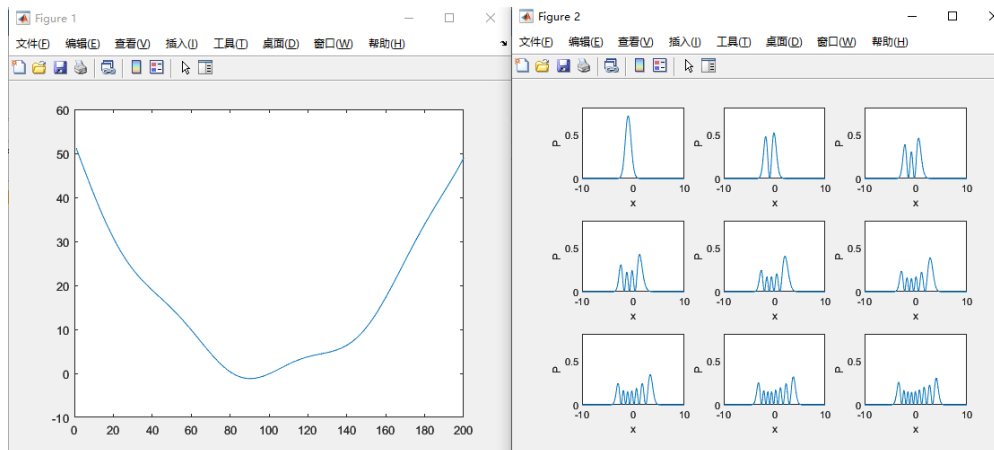
列 1 至 5

0.2292    1.4344    2.5448    3.5754    4.5584

列 6 至 9

5.5268    6.4983    7.4780    8.4658

a=2



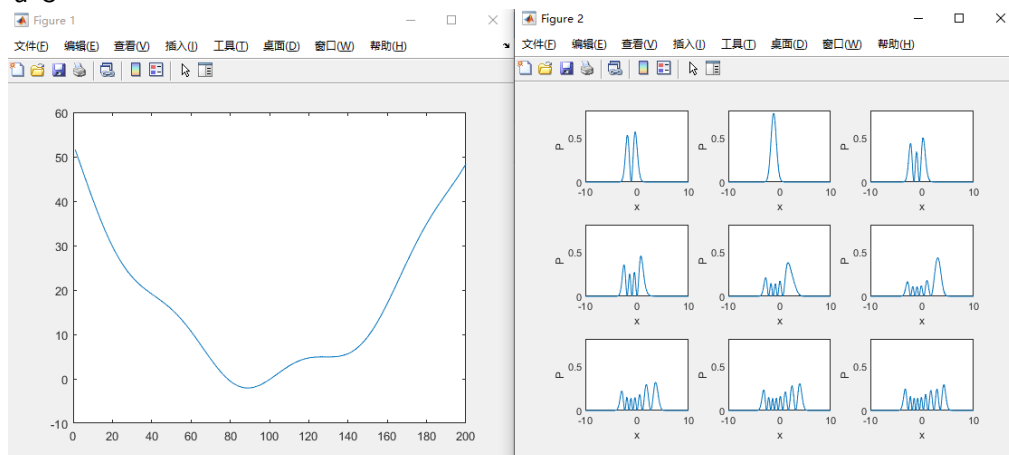
列 1 至 5

-0.3832    1.1497    2.5372    3.7382    4.7152

列 6 至 9

5.5741    6.4695    7.4106    8.3836

a=3



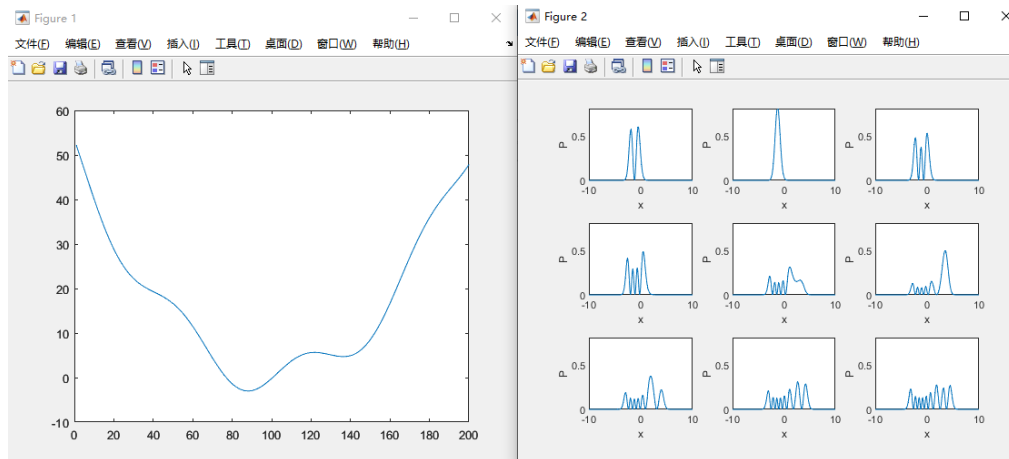
列 1 至 5

-1.1318    0.6912    2.3682    3.8536    4.9859

列 6 至 9

5.6093    6.4210    7.3201    8.2762

a=4



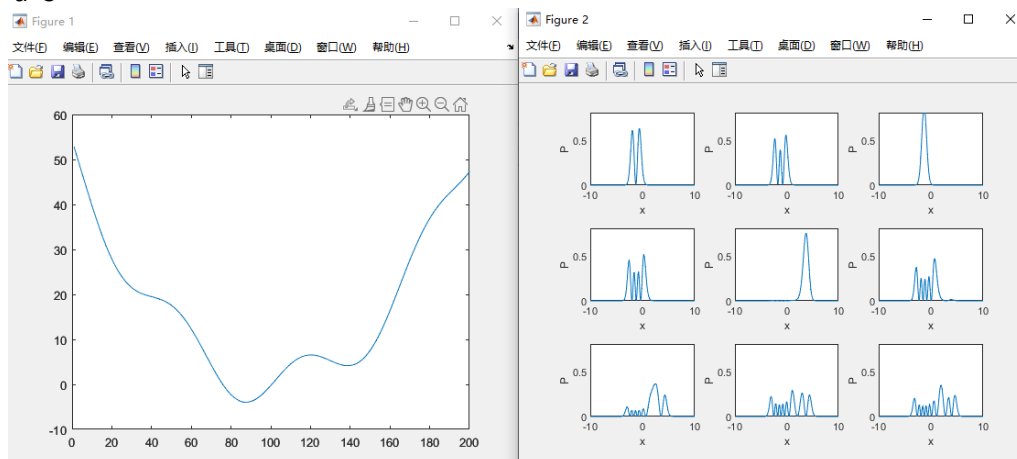
列 1 至 5

-1.9436    0.1306    2.0625    3.8204    5.2554

列 6 至 9

5.5175    6.4483    7.2320    8.1761

a=5



列 1 至 5

-2.7904    -0.4930    1.6644    3.6592    5.1170

列 6 至 9

5.4412    6.6261    7.1453    8.1317

当 $a=0$ ，即标准的谐振子，其本征能量有解析解即这里为 $(n+1/2)$ ，可以看到计算结果完全符合这一结果，而且波函数模方的图样也符合厄密多项式，说明程序的正确性！

当 $a$ 逐渐增大，能量本征值逐渐减小， $a=2$ 时开始基态能量达到了负值，波函数也从刚开始的略微偏离厄密多项式，到完全偏离，基态开始出现双峰的结构。

下面为对应的matlab代码：

```

=====matlab代码=====
clear
clc

a = 0;
k = 1;
X = 10;    % 定义域: [-X,X]
N = 200;    % 格点数 /in [-X,X]
dx = 2*X/N; % 空间步长:定义域长度/格点数

x = linspace(-X,X,N);

% 势场
n = 2;    % 次数n
dxi = (2*X)/(N-1);
V = zeros([N,1]);
for xi = -X:dxi:X
    V(round((xi+X)/dxi+1)) = 1/2*xi^n + a*sin(k*xi);
end
A = spdiags(V,0,N,N); % 提取V的对角线并生成势能矩阵
figure(1)
plot(V)

% 动能
H = zeros(N,3);
H(1:N,1) = -0.5/dx^2;
H(1:N,2) = 1/dx^2;
H(1:N,3) = -0.5/dx^2;
B = spdiags(H,-1:1,N,N);

C = A+B;
E = 9;    % 能级个数
% 求特征值
[Vector, Value] = eigs(C,E,0); % 求指定的几个特征值

% 画图
for i = 1:E
    psi = Vector(:,i);
    figure(2)
    subplot(3,3,i)
    plot(x,abs(psi).^2/sum(abs(psi).^2*dx))
    ylim([0 0.8])
    xlabel('x');ylabel('P');
end

% 输出基态附近的能量值
v=[];
for i = 1:length(Value)
    v(i) = Value(i,i);
end
sort(v)

=====

```

## ■ 二维定态薛定谔方程

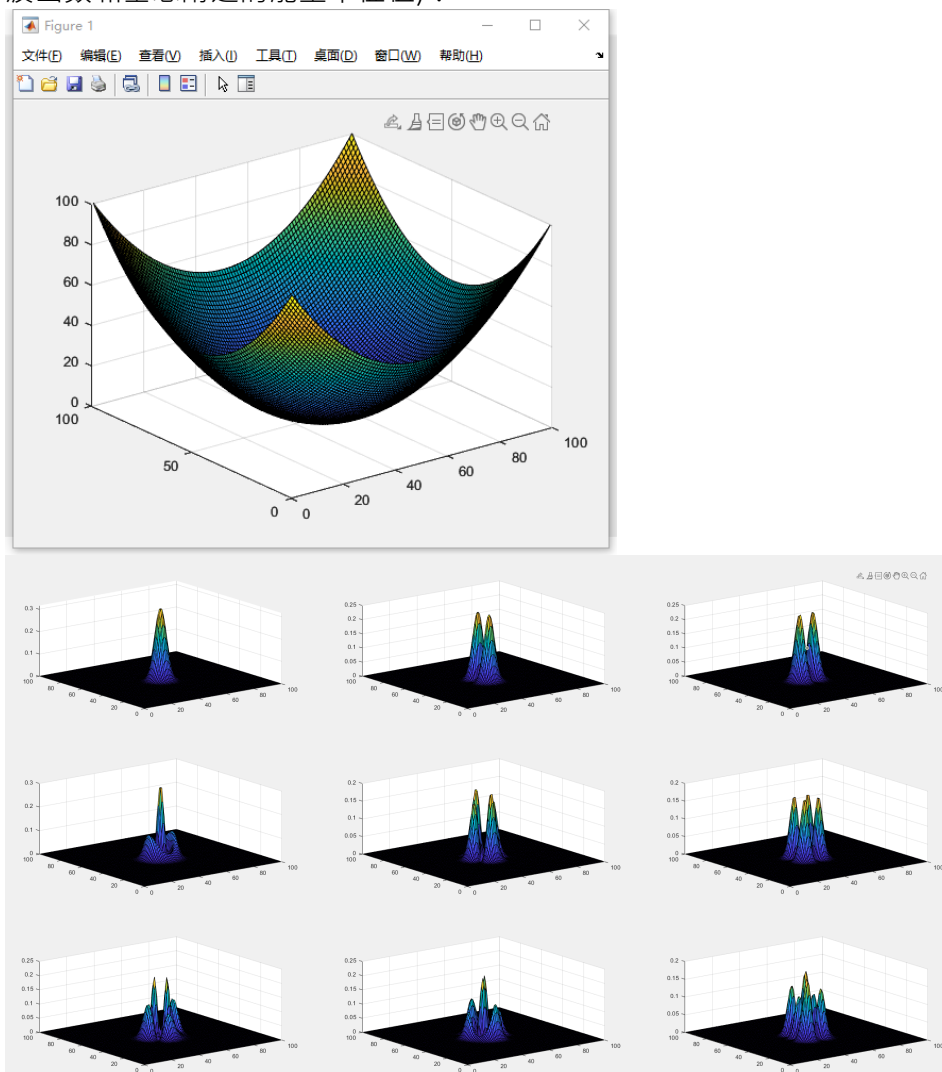
与一维情况类似，我们采用离散的方法进行，只不过动能项略有变化：

$$-\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) \sim -\frac{1}{2} \left( \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) = -\frac{1}{2\Delta x^2} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j})$$

$$\sim -\frac{1}{2\Delta x^2} \begin{pmatrix} -4 & 1 & & \\ 1 & -4 & 1 & \\ & 1 & -4 & 1 \\ & & 1 & \ddots \end{pmatrix}$$

并且我们需要对二维的坐标进行一维化，即 $(i,j)$ 对应 $N(j-1)+i$ 的一维坐标，从而利用matlab当中的`reshape`函数进行。

为了验证程序的正确性，我们首先计算了二维谐振子的能量本征值(从左到右分别是势场 $V(x)$ 、波函数和基态附近的能量本征值)：



列 1 至 5

1.0075    2.0125    2.0125    3.0123    3.0123

列 6 至 9

3.0175    4.0069    4.0069    4.0173

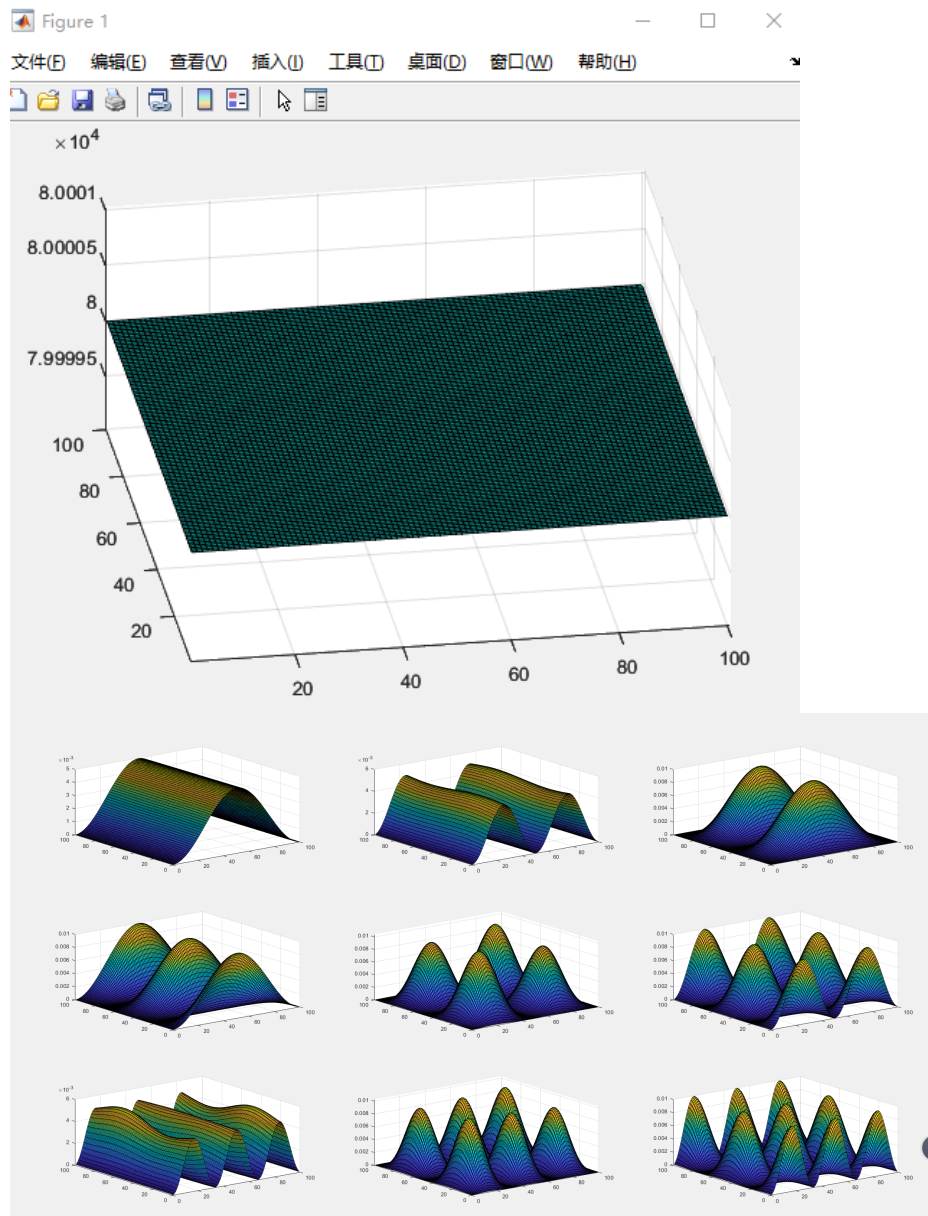
可以看到，本征能量近似为： $1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 4 \dots$ ；这完全符合二维谐振子的本征能量： $(1+nx+ny)$ ，且具有相应的简并度！因此程序的正确性得以验证！

接下来，我们计算心形的势场：

$$(x^2 + y^2 + ax - a\sqrt{x^2 + y^2} = 0)$$

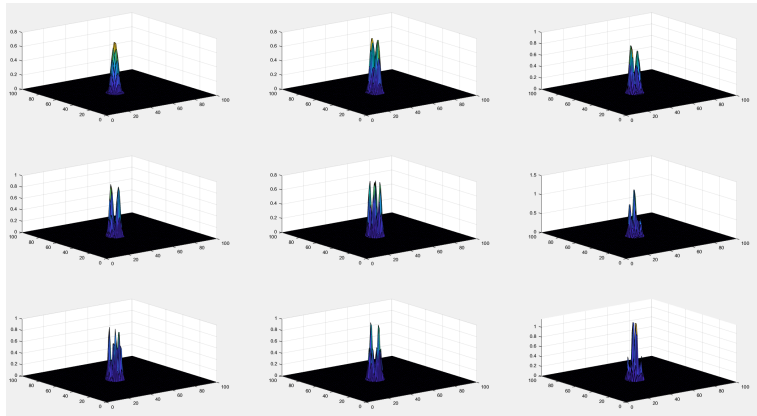
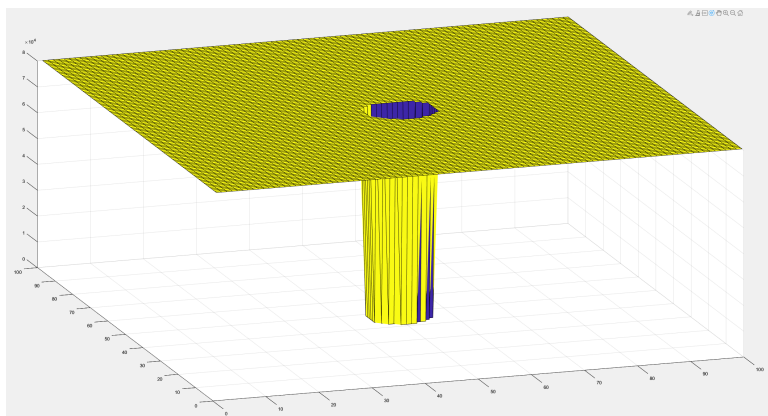
我们取 $a=0 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3$

$a=0$



```
ans =  
  
1.0e+04 *  
  
8.0000    8.0000    8.0000
```

a=1



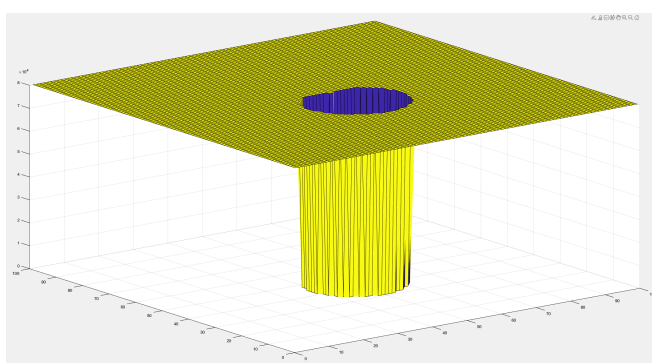
列 1 至 4

```
1.7804    4.2061    4.6800    7.6214
```

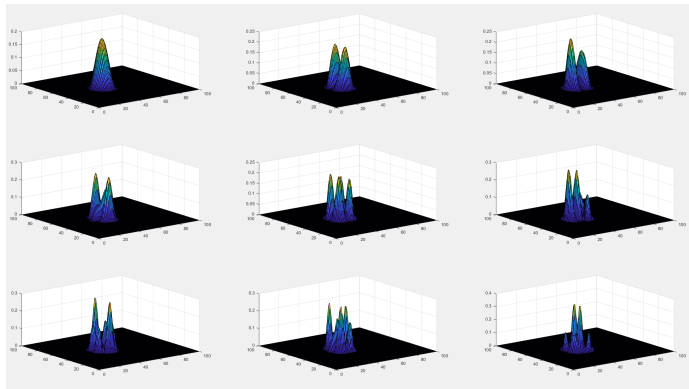
列 5 至 8

```
7.7878    9.1663    11.6679    11.6943
```

a=2







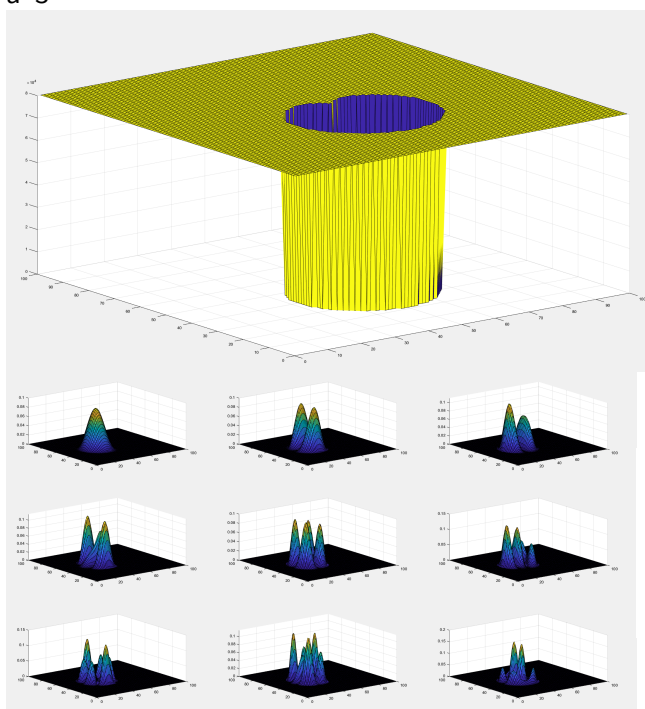
列 1 至 4

0.4741    1.0917    1.2877    2.0366

列 5 至 8

2.0727    2.5530    3.1386    3.2446

a=3



列 1 至 4

0.2174    0.4986    0.5912    0.9409

列 5 至 8

0.9428    1.1704    1.4384    1.5070

当 $a=0$ 时，相当于没有势场，从而解出的是驻波；当 $a$ 逐渐增大，可以看到基态能量不断下降，而且基态波函数局域在势场里面，并且逐渐变胖，这也符合 $a$ 增大时，势场的区域增大的变化趋势。

下面为对应的matlab代码：

```
=====matlab代码=====
clc
clear

a = 3;

% 最好设为偶数！
X = 10;    % 定义域：[-X,X]&[-X,X]
N = 100;    % 一维格点数 /in [-X,X]

% 空间步长:定义域长度/格点数
```

```

dx = 2*X/N;
dy = dx;

% 势场
V = zeros([N,N]);
dxi = (2*X)/(N-1);
for xi = -X:dxi:X
    for yi = -X:dxi:X
        V(round((xi+X)/dxi+1),round((yi+X)/dxi+1)) = 1/2*(xi^2+yi^2); % 二维谐振子

% if(xi*xi+yi*yi+a*xi-a*sqrt(xi*xi+yi*yi)<0) % 心形线势场
%     V(round((xi+X)/dxi+1),round((yi+X)/dxi+1)) = 0;
% else
%     V(round((xi+X)/dxi+1),round((yi+X)/dxi+1)) = 8e4;
% end

    end
end
VV = reshape(V',[N*N,1]); % 转为一维对角元素
A = spdiags(VV,0,N*N,N*N); % 提取V的对角线并生成势能矩阵

figure(1)
surf(V)

% 动能
H = zeros(N*N);
for j = 1 : N
    for i = 1 : N

        H(N*(j-1)+i,N*(j-1)+i) = -4;
        if(N*(j-1)+i+1>0 && N*(j-1)+i+1<N^2) % i+1
            H(N*(j-1)+i,N*(j-1)+i+1) = 1;
        end
        if(N*(j-1)+i-1>0 && N*(j-1)+i-1<N^2) % i-1
            H(N*(j-1)+i,N*(j-1)+i-1) = 1;
        end
        if(N*(j)+i>0 && N*(j)+i<N^2) % j+1
            H(N*(j-1)+i,N*(j)+i) = 1;
        end
        if(N*(j-2)+i>0 && N*(j-2)+i<N^2) % j-1
            H(N*(j-1)+i,N*(j-2)+i) = 1;
        end
    end
end

H = -1/(2*dx^2).*H;
B = sparse(H);

C = A+B;
E = 9; % 能级个数
% 求特征值

```

```

[Vector, Value] = eigs(C,E,0); % 求指定的几个特征值

% 画图
for i = 1:E
    psi = Vector(:,i);
    psi = reshape(psi,[N,N]);
    psi = abs(psi).^2/sum(sum(abs(psi).^2*dx*dx));
    figure(2)
    subplot(3,3,i)
    surf(psi)
end

% 输出基态附近的能量值
v=[];
for i = 1:length(Value)
    v(i) = Value(i,i);
end
sort(v)

=====

```