1D+2D定态薛定谔方程

- 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：

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

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

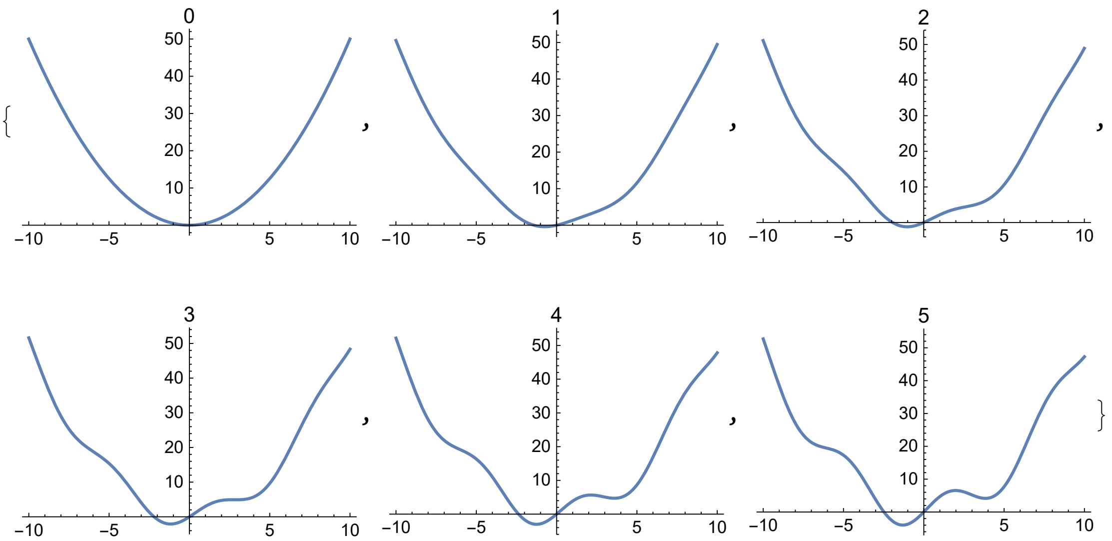
其中一维的势能设为：

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

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

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

Out[ ]= {



}

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：

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

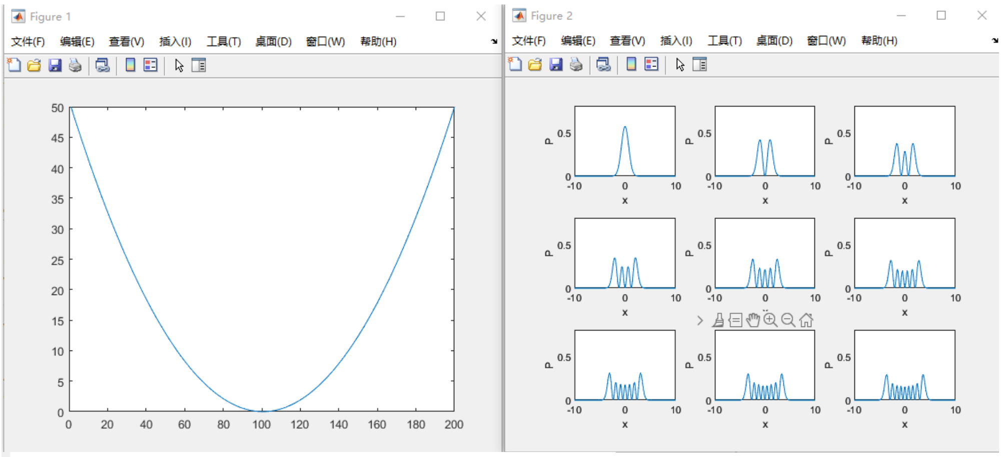
(b)势能的离散化：

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

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。

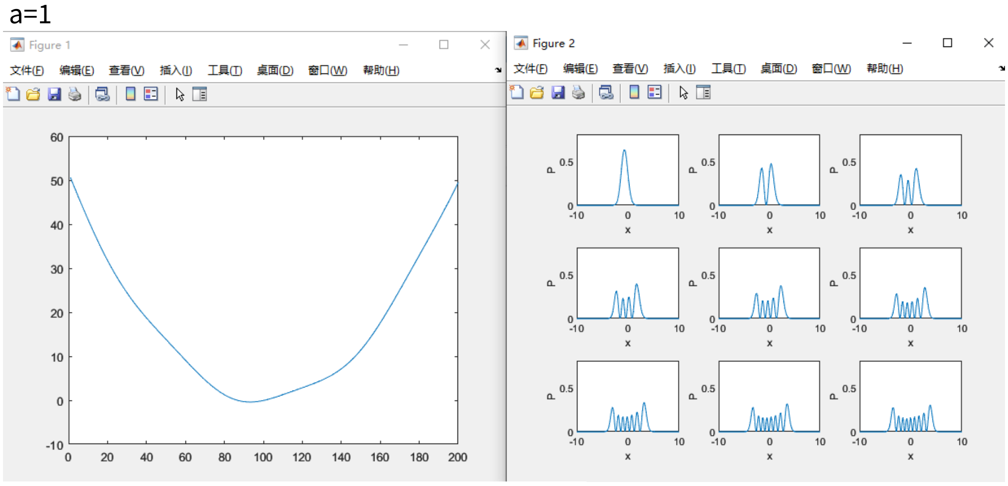
下面展示，从a取0到5间隔为1的能量本征值和波函数模方的结果(从左到右分别是势场V(x)、波函数和基态附近的能量本征值)：

a=0



```
列 1 至 5

  0.5022    1.5060    2.5085    3.5097    4.5096

列 6 至 9

  5.5083    6.5057    7.5018    8.4967
```

a=1



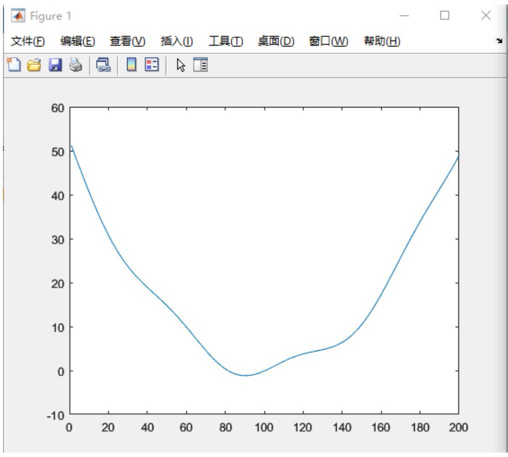
列 1 至 5

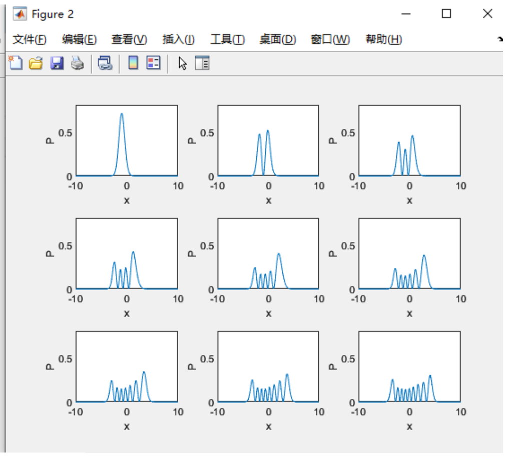
0.2292 1.4344 2.5448 3.5754 4.5584

列 6 至 9

5.5268 6.4983 7.4780 8.4658

a=2





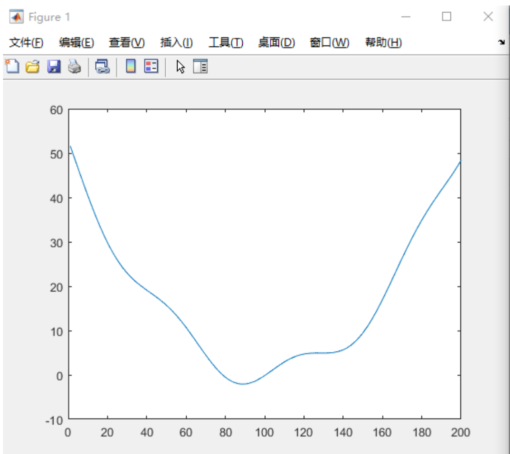
列 1 至 5

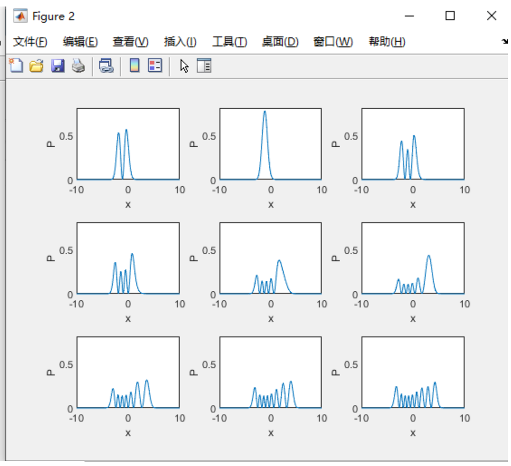
-0.3832 1.1497 2.5372 3.7382 4.7152

列 6 至 9

5.5741 6.4695 7.4106 8.3836

a=3





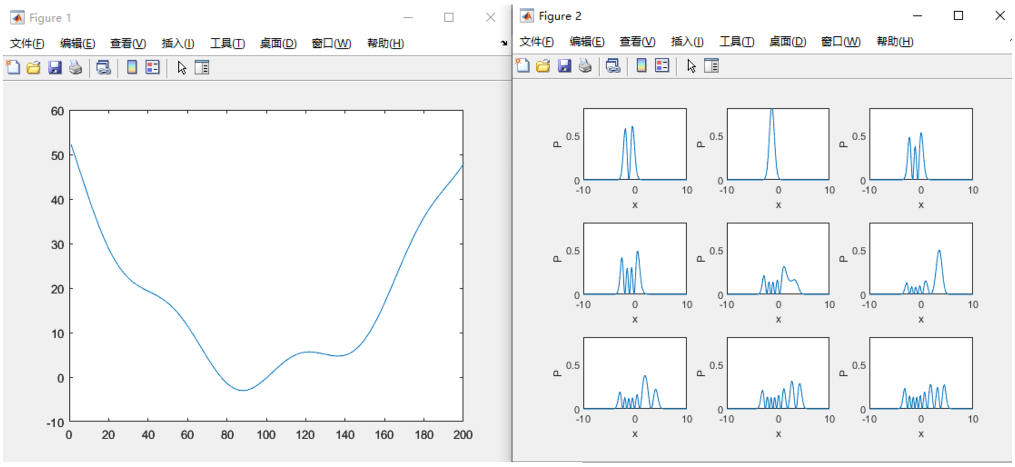
列 1 至 5

-1.1318 0.6912 2.3682 3.8536 4.9859

列 6 至 9

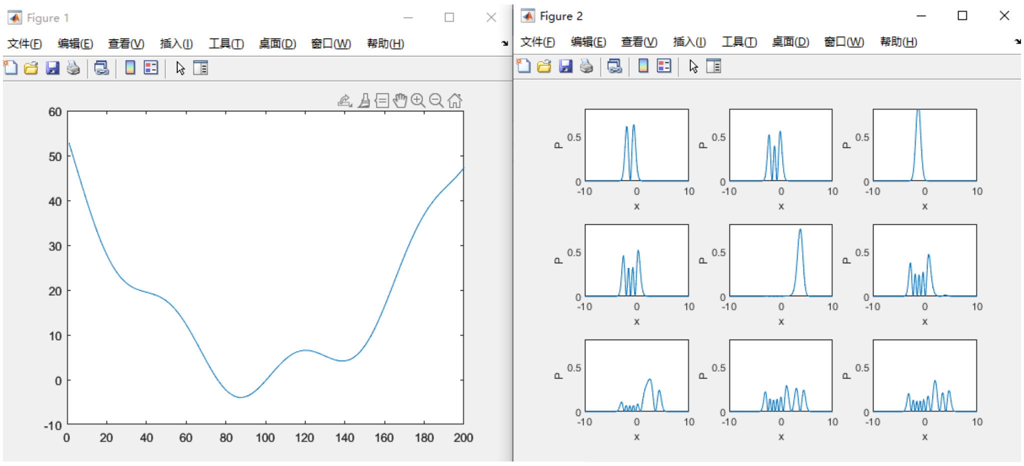
5.6093 6.4210 7.3201 8.2762

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

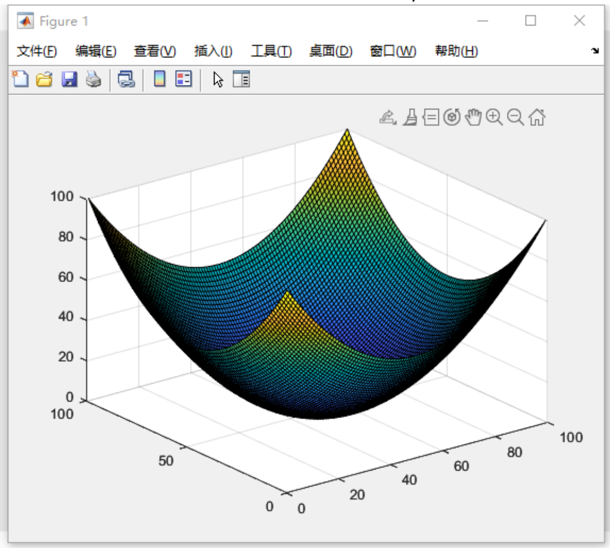
与一维情况类似，我们采用离散的方法进行，只不过动能项略有变化：

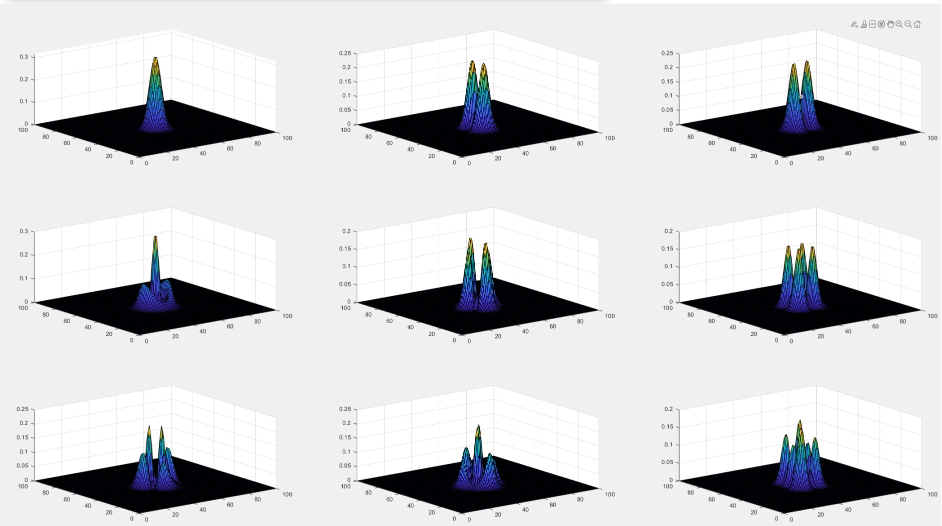
$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right) \sim -\frac{1}{2}\left(\frac{\psi_{i+1,j}-2\psi_{i,j}+\psi_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{\psi_{i,j+1}-2\psi_{i,j}+\psi_{i,j-1}}{\Delta x^2}\right)=-\frac{1}{2\Delta x^2}\left(\psi_{i+1,j}+\psi_{i-1,j}+\psi_{i,j+1}+\psi_{i,j-1}-\cdots\right.$$

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

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
```

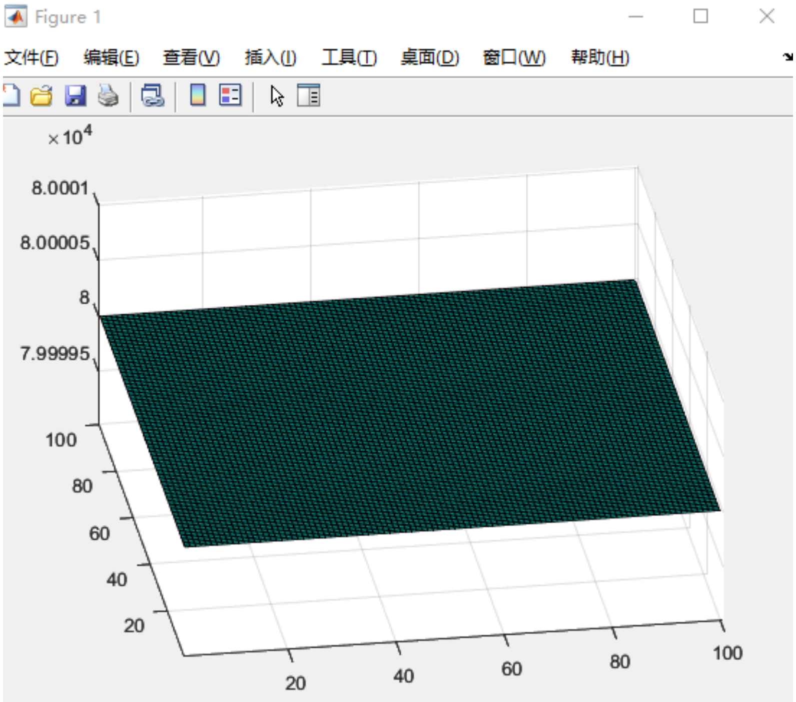
可以看到，本征能量近似为：1，2，2，3，3，3，4，4，4...； 这完全符合二维谐振子的本征能量：(1+nx+ny), 且具有相应的简并度！因此程序的正确性得以验证！

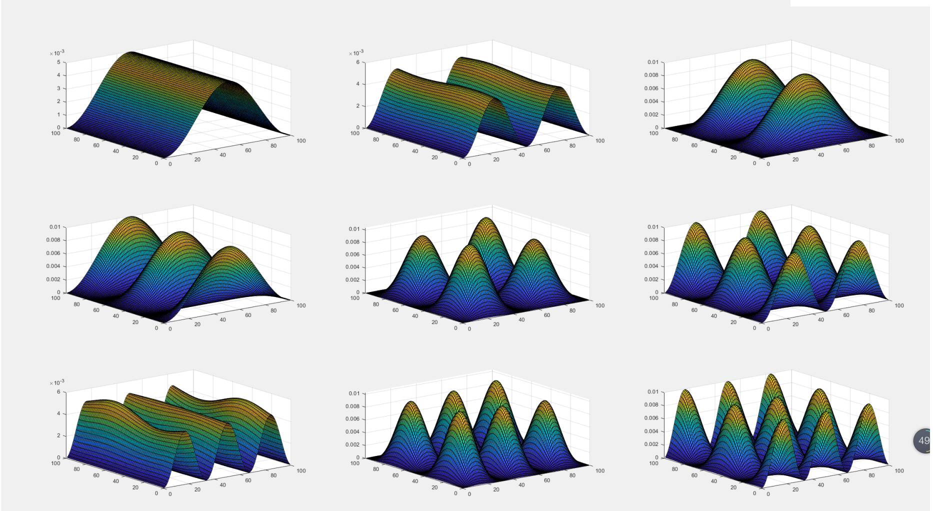
接下来，我们计算心形的势场：

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

我们取a=0，1，2，3

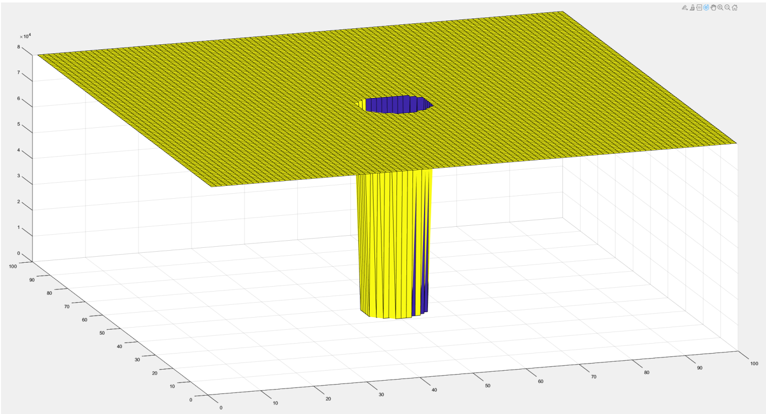
a=0

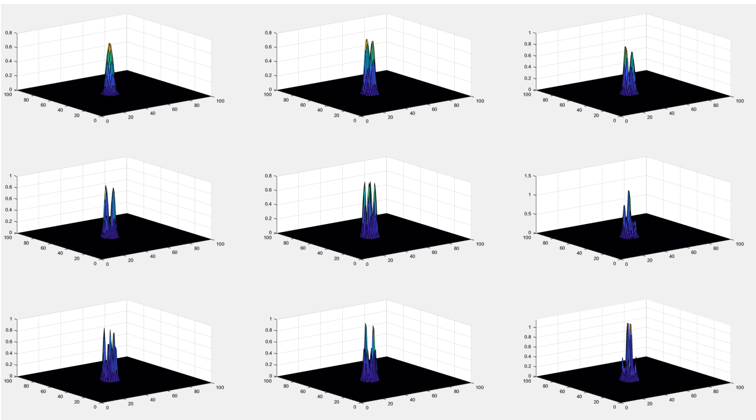




```
ans =

   1.0e+04 *

    8.0000    8.0000    8.0000
```

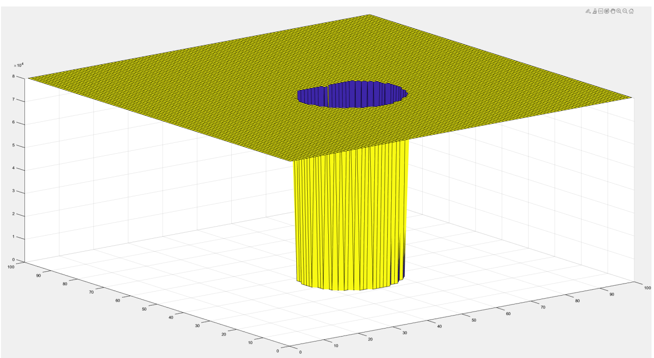
a=1

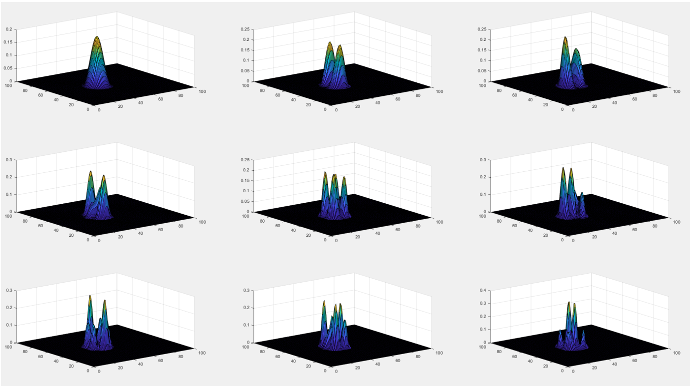




```
 列 1 至 4

   1.7804    4.2061    4.6800    7.6214

 列 5 至 8

   7.7878    9.1663   11.6679   11.6943
```

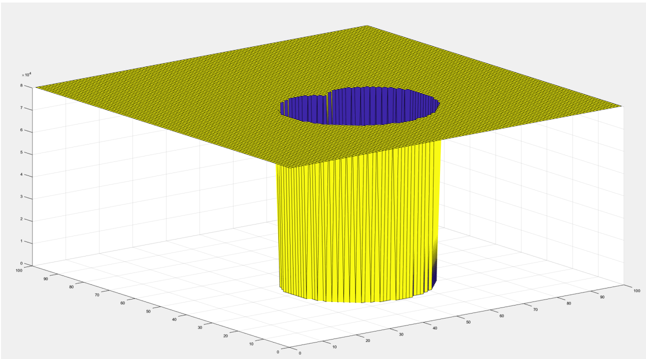
a=2

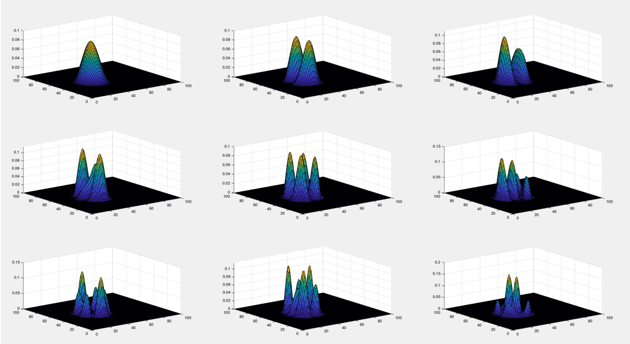




```
列 1 至 4

  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)

================================================
```