DSQD的推导

$$H=\frac{1}{2m^*}\left[\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right]^2+V(\mathbf{r}),\ \text{其中}\ V(\mathbf{r})=\frac{1}{2}m^*\omega_0^2r^2+\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\beta}{r^2},$$

在柱坐标下的展开为：

In[∘]:=
```
Clear["Global`*"]
```
清除

In[∘]:=
```
Laplacian[f[r, θ, z], {r, θ, z}, "Cylindrical"] // Expand // TraditionalForm
```
拉普拉斯算子 展开 传统格式

Out[∘]//TraditionalForm=

$$\frac{f^{(0,2,0)}(r,\theta,z)}{r^2}+f^{(0,0,2)}(r,\theta,z)+\frac{f^{(1,0,0)}(r,\theta,z)}{r}+f^{(2,0,0)}(r,\theta,z)$$

由于波函数只含(r,ϕ),故不考虑对z方向的求导．对于：

$$p^2+\left(\frac{e}{c}A\right)^2+p*\frac{e}{c}A+\frac{e}{c}A*p$$

In[∘]:=
```
A = {0, B*r/2, 0};
Div[A, {r, θ, z}, "Cylindrical"]
A.Grad[f[r, θ, z], {r, θ, z}, "Cylindrical"]
e/2 A.A
```
散度 梯度

Out[∘]= 0

Out[∘]= $\frac{1}{2}B\,f^{(0,1,0)}[r,\theta,z]$

Out[∘]= $\frac{1}{8}B^2\,e\,r^2$

其中第一项为0；第二项化为z轴方向角动量即Lz；第三项化为谐振子角频率当中的常数；综上，可以将薛定谔方程写作：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}m^*\omega_1^2r^2+\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\beta}{r^2}+\frac{\omega_c}{2}L_z\right]\psi=E\psi,\ \text{其中}$$

$\omega_c=eB/m^*c$ ， $\omega_1=\sqrt{\omega_0^2+\omega_c^2/4}$

In[∘]:=

In[∘]:=
```
ψ[r_, ϕ_] := R[r] * E^(I m ϕ)/Sqrt[2 Pi]
```

```
-1/2 * Laplacian[ψ[r, ϕ], {r, ϕ, z}, "Cylindrical"] +
      拉普拉斯算子
  1/2 r^2 ψ[r, ϕ] + 1/2 * β/r^2 ψ[r, ϕ] - I wc/2 D[ψ[r, ϕ], ϕ] == e * ψ[r, ϕ] // Simplify
                                     …      偏导                        化简
```

Out[∘]= $\frac{1}{r} e^{i m \phi} \left(\left(m^2 - 2 e r^2 + r^4 + m r^2 wc + \beta\right) R[r] - r \left(R'[r] + r R''[r]\right) \right) == 0$

In[∘]:=
```
(m^2 - 2 e r^2 + r^4 + m r^2 wc + β) R[r] - r (R'[r] + r R''[r]) == 0 // TraditionalForm
                                                                     传统格式
```

Out[∘]//TraditionalForm=

$$R(r)\left(\beta - 2 e r^2 + m^2 + m r^2 \mathrm{wc} + r^4\right) - r\left(r R''(r) + R'(r)\right) = 0$$

将上式整理，得到：

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{L^2}{r^2}+(2E'-r^2)R=0,\ \text{其中}\ E'=E-\frac{m\hbar\omega_c}{2},\quad L=\sqrt{m^2+\beta}.$$

再令：

In[∘]:=
```
R[r] = r^L E^(-r^2/2) u[r]
```

Out[∘]= $e^{-\frac{r^2}{2}} r^L u[r]$

In[∘]:=
```
D[R[r], r, r] + 1/r D[R[r], r] - L^2/r^2 + (2 ee - r^2) R[r] == 0 // Simplify
偏导              偏导                                               化简
```

Out[∘]= $\frac{1}{r^2} e^{-\frac{r^2}{2}} \left(-e^{\frac{r^2}{2}} L^2 + r^L \left(L^2 + 2 \left(-1 + ee\right) r^2 - 2 L r^2\right) u[r] - r^{1+L} \left(-1 - 2 L + 2 r^2\right) u'[r] + r^{2+L} u''[r] \right) ==$
0

整理得到：

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\left(\frac{2L+1}{r}-2r\right)\frac{du}{dr}+[2E'-2(L+1)]u=0.$$

综上得到波函数的表达式：

In[∘]:=
```
ψ[r_, ϕ_, n_, m_] := Sqrt[n!/(Pi * Gamma[Sqrt[m^2 + β] + n + 1])] r^Sqrt[m^2+β] E^(-r^2/2) LaguerreL[n, Sqrt[m^2 + β], r^2] E^(I m ϕ)
                                                                                          拉盖尔函数
```

In[∘]:=

能量的表达式为：

In[∘]:=
```
e[n_, m_] := (2 n + 1 + Sqrt[m^2 + β]) Sqrt[w0^2 + wc^2/4] + m * wc/2
```

In[∘]:= ψ[r, ϕ, 0, 0]
ψ[r, ϕ, 1, 1]

Out[∘]=
$$\frac{e^{-\frac{r^2}{2}} r^{\sqrt{\beta}} \sqrt{\frac{1}{\text{Gamma}\left[1+\sqrt{\beta}\right]}}}{\sqrt{\pi}}$$

Out[∘]=
$$\frac{e^{-\frac{r^2}{2}+i\phi} r^{\sqrt{1+\beta}} \left(1-r^2+\sqrt{1+\beta}\right) \sqrt{\frac{1}{\text{Gamma}\left[2+\sqrt{1+\beta}\right]}}}{\sqrt{\pi}}$$

In[∘]:= e[0, 0]
e[1, 1]

Out[∘]=
$$\sqrt{w0^2+\frac{wc^2}{4}} \left(1+\sqrt{\beta}\right)$$

Out[∘]=
$$\frac{wc}{2}+\sqrt{w0^2+\frac{wc^2}{4}} \left(3+\sqrt{1+\beta}\right)$$

In[∘]:=

In[∘]:= Integrate[$\frac{e^{-\frac{r^2}{2}} r^{\sqrt{\beta}} \sqrt{\frac{1}{\text{Gamma}\left[1+\sqrt{\beta}\right]}}}{\sqrt{\pi}}$ * r * Cos[ϕ] * $\frac{e^{-\frac{r^2}{2}+i\phi} r^{\sqrt{1+\beta}} \left(1-r^2+\sqrt{1+\beta}\right) \sqrt{\frac{1}{\text{Gamma}\left[2+\sqrt{1+\beta}\right]}}}{\sqrt{\pi}}$,
积分 余弦

{r, 0, Infinity}, {ϕ, 0, 2 Pi}] // TraditionalForm
无穷大 圆周率 传统格式

Out[∘]//TraditionalForm=
$$\frac{1}{4}\left(\sqrt{\beta+1}-\sqrt{\beta}\right) \sqrt{\frac{1}{\Gamma\left(\sqrt{\beta}+1\right)}} \sqrt{\frac{1}{\Gamma\left(\sqrt{\beta+1}+2\right)}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\left(\sqrt{\beta}+\sqrt{\beta+1}+2\right)\right)$$