第三次作业

第一小题:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

用无量纲的变量$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$代替 x，可得 $H=\hbar\omega\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2\right]$，其解析解为 $E=\hbar\omega\left[n+\frac{1}{2}\right]$，其中，$n=0,1,2,\cdots$。若令$\hbar\omega=1$，$H=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2$，解析解可写为 $E=n+\frac{1}{2}$。对 H 作数值计算，取步长 $h=\frac{L}{N}=\Delta x=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\Delta\xi$，实际计算中$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$会被消掉，故$\Delta\xi$代替 h 不影响结果。

结果讨论：固定 $h=0.001$ 时，改变 L、N，可发现当 L、N 越大，数值解与解析解间低能级的误差越小，如表 1 所示。但不管 L、N 多大，高能级的误差都逐渐增大。

表 1 $h=0.001$ 时改变 L、N，观察低能级解析解和数值解的差别

	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
解析解	0.5	1.5	2.5	3.5	4.5
$L=1$ $N=1001$	4.93151044737641	19.6958905344582	44.2747819397437	78.6811685409946	122.916353057083
$L=2$ $N=2001$	1.29612312770590	5.06600262234231	11.2369435937589	19.8605342880292	30.9438301231049
$L=4$ $N=4001$	0.537327103299977	1.76404921085696	3.39763291252347	5.58036790932628	8.36183288162222
$L=8$ $N=8001$	0.500000455750021	1.50001434218614	2.50019945128994	3.50168073795429	4.50958949099117

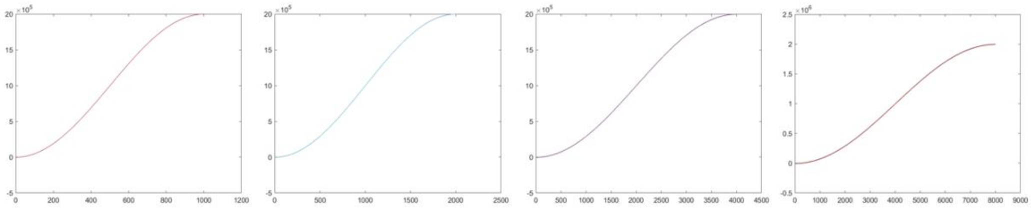

图 1 $h=0.001$ 时改变 L、N，观察误差。能级越高，误差越大。

现在再固定 L，改变 N，发现不管 N 如何增大，解析解和数值解之间的误差特别大，即使低能级间误差也极大，如表 2 所示。

表 2 $L=1$ 时，不同 N 下低能级解析解和数值解间的差别

	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
解析解	0.5	1.5	2.5	3.5	4.5
$L=1$ $N=1001$	4.93151044737641	19.6958905344582	44.2747819397437	78.6811685409946	122.916353057083
$L=1$ $N=2001$	4.94130612663513	19.7351693816396	44.3633763463864	78.8390655363717	123.163789681531
$L=1$ $N=4001$	4.94621428118392	19.7548410329234	44.4077122594004	78.9179987862575	123.287315311630
$L=1$ $N=8001$	4.94867093890568	19.7646849117551	44.4298898422902	78.9574613583921	123.349029288674

再固定 N，改变 L，发现随着的增大，低能级的解析解和数值解间的误差减小（如表 3 所示），高能级的几乎无影响。

表 3 $N=8001$ 时，不同 L 下低能级解析解和数值解间的差别

	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
解析解	0.5	1.5	2.5	3.5	4.5
$L=10$ $N=8001$	0.499999951241922	1.49999975959291	2.49999944824074	3.49999998793629	4.50001050990390
$L=8$ $N=8001$	0.500000455750021	1.50001434218614	2.50019945128994	3.50168073795429	4.50958949099117
$L=4$ $N=8001$	0.537394111075159	1.76443265885267	3.39871035257137	5.58250354474557	8.36535464100869
$L=2$ $N=8001$	1.29787499770430	5.07318512633181	11.2533528019190	19.8899069470908	30.9899106374567
$L=1$ $N=8001$	4.94867093890568	19.7646849117551	44.4298898422902	78.9574613583921	123.349029288674

通过这些尝试，发现 L 越大，N 越大，低能级的数值解与解析解间的误差越小。

第二小题

采用第一小题的做法，用无量纲的变量$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ 代替 x，并取 $k=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，则 $A\cos(kx+\theta)$ 可化为 $A\cos(\xi+\theta)$，若令$\hbar\omega=1$，$H=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2+A\cos(\xi+\theta)$。

现在考察相同θ下，低能级随 A 的变化

a) $\theta=1$

表 4 $\theta=1$ 时不同 A 下低能级本征值

	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
$A=1$	0.637475519284959	1.66989181053778	2.59316543171669	3.48042699768669	4.38691710808903
$A=0.1$	0.539715823243520	1.52047609308230	2.50542434701352	3.49421267794577	4.48638275877372
$A=0.01$	0.504184881671883	1.50209785850590	2.50052703771215	3.49939018691773	4.49862254628067
$A=0.001$	0.500420527939161	1.50021018178652	2.50005228923445	3.49993909993812	4.49987212446152

可见，A 越小，能级越接近谐振子的能级。

现在考察相同 A 下，低能级随θ的变化

b)　$A = 0.001$

	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
$\theta=0$	0.500778731372309	1.50038916726190	2.50009695398124	3.49988680955293	4.49975367679245
$\theta=0.1$	0.500774838139670	1.50038722224523	2.50009646896538	3.49988737803894	4.49975496447355
$\theta=0.01$	0.500778692444932	1.50038914804475	2.50009694930244	3.49988681521814	4.49975368984384
$\theta=0.001$	0.500778730855846	1.50038916702759	2.50009695389199	3.49988680943385	4.49975367698893

可见，θ的大小并不会影响本征值。

第三小题：

a)　椭圆型无限深势阱的本征值和本征态（程序参见：disancizuoyedisanxiaoti_a_tuoyuan.m）

势阱如下：

$$V = \begin{cases} 0, \left(\frac{x}{5}\right)^2 + \left(\frac{y}{3}\right)^2 \leq 1 \\ \infty, \left(\frac{x}{5}\right)^2 + \left(\frac{y}{3}\right)^2 > 1 \end{cases}$$

结果如下：

波函数的分布与二维无限深方势阱中波函数的分布相似，都是集中在某些区域，且波函数的对称分布与势阱的对称性有关：椭圆的中心位于原点，其对称轴分别为 x 轴和 y 轴，波函数的分布也关于 x 轴和 y 轴对称。

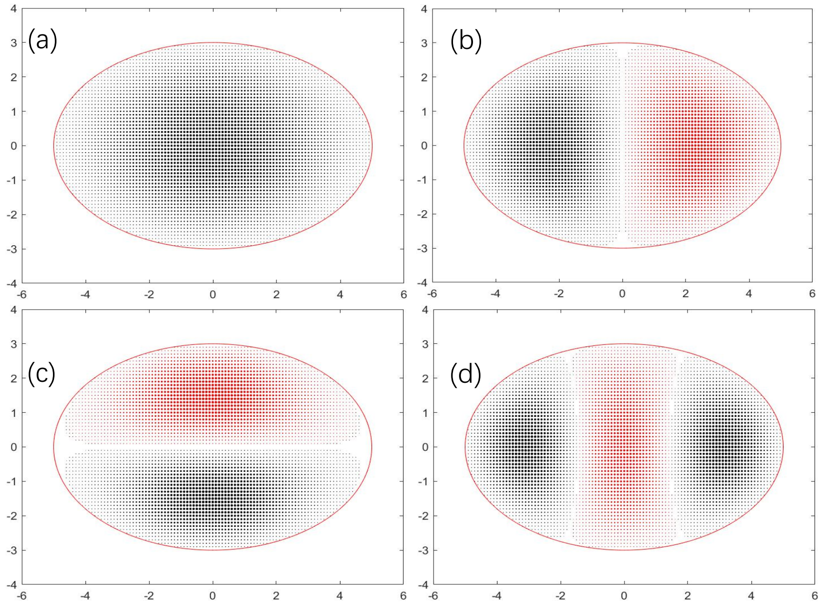

图 2　势阱中波函数的分布：(a)最低能级，(b)次低能级，(c)第三能级，(d)第四能级。红色曲线为椭圆曲线，标准方程为$\left(\frac{x}{5}\right)^2 + \left(\frac{y}{3}\right)^2 = 1, x \in [-5,5]$，红色区域和黑色区域为波函数主要分布的区域，其他区域为波函数为 0。

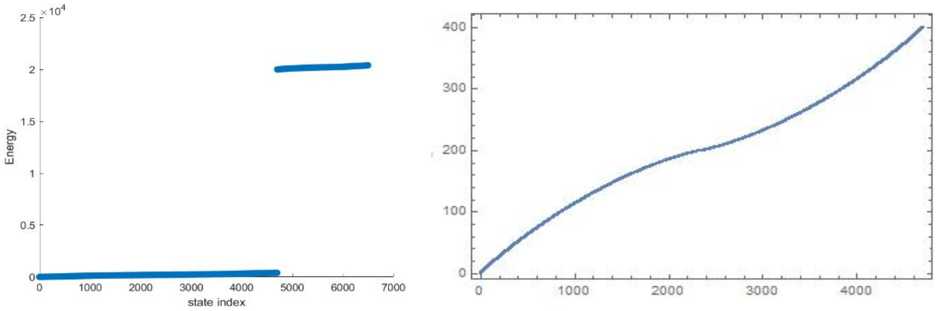

图 3 能谱。右边为低激发能级。

b) 心型无限深势阱的本征值和本征态（程序参见：disancizuoyedisanxiaoti_b.m）

势阱如下:

$$\begin{cases} 0, y \le \sqrt{2\sqrt{x^2}-x^2}\ and\ y \ge \sin^{-1}(|x|-1)-\frac{\pi}{2} \\ \infty, other \end{cases}$$

结果如下:

波函数的分布与二维无限深方势阱中波函数的分布相似，都是集中在某些区域，且波函数的对称分布与势阱的对称性有关：这里的心形势阱只关于 y 轴对称，波函数的分布也只关于 y 轴对称。

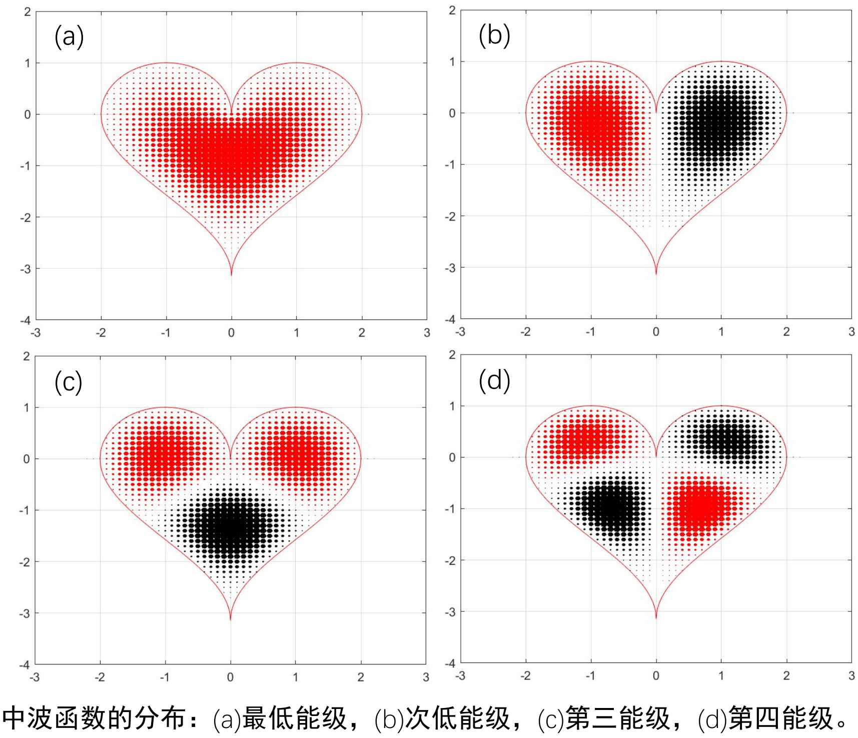

图 4 势阱中波函数的分布：(a)最低能级，(b)次低能级，(c)第三能级，(d)第四能级。红色曲线为心形曲线，方程为$\begin{cases} \sqrt{2\sqrt{x^2}-x^2}, 上部分 \\ \sin^{-1}(|x|-1)-\frac{\pi}{2}, 下部分 \end{cases}, x \in [-2,2]$，红色区域和黑色区域为波函数主要分布的区域，其他区域为波函数为 0。

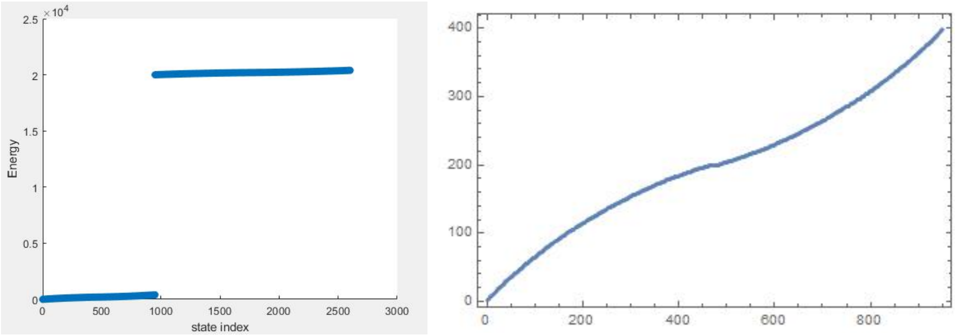

图 5 能谱。右边为低激发能级。

两种势阱的低激发能级比较

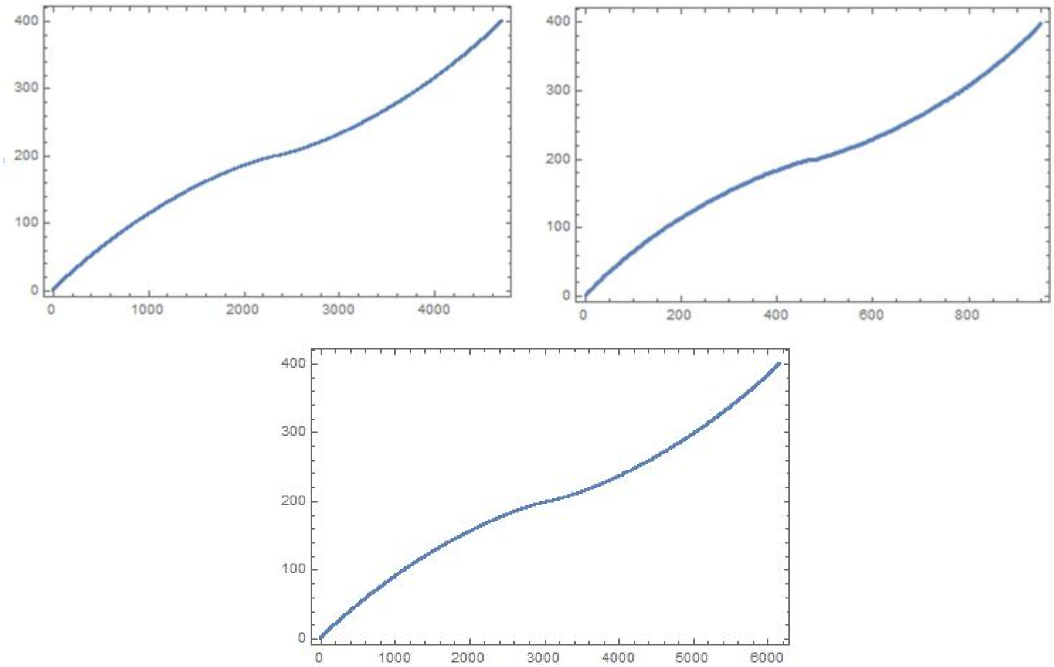

图 6 低激发能级的比较：第一行，椭圆形无限深势阱（左边），心形无限深势阱（右边）。第二行，矩形无限深方势阱。可见这三种无限深势阱的低激发能级所处的能量范围是相同的，只是势阱中所能容纳的个数不同，那么矩形无限深方势阱的能级表达式也应适用于其他两种无限深势阱。

c) 操场形无限深势阱的本征值和本征态（程序参见：disancizuoyedisanxiaoti_a_caochang.m）

势阱如下：

$$V = \begin{cases} 0, -3 \leq x \leq 3 and -3-\sqrt{9-x^2} \leq y \leq 3+\sqrt{9-x^2} \\ \infty, other \end{cases}$$

结果如下：

波函数的分布与二维无限深方势阱中波函数的分布相似，都是集中在某些区域，且波函数的对称分布与势阱的对称性有关。势阱既关于 x 轴对称，又关于 y 轴对称，故波函数的分布也是既关于 x 轴对称，又关于 y 轴对称。

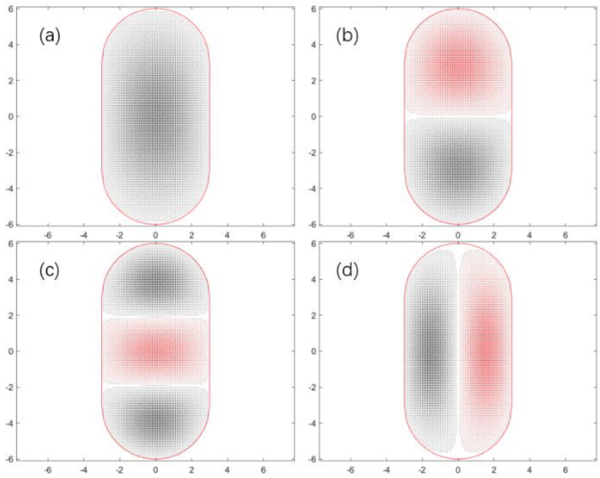

图 7 不同能级的波函数分布：(a)最低能级的波函数分布；(b) 次低能级的波函数分布；(c) 第三能级的波函数分布；(d) 第四能级的波函数分布。红色曲线为势阱的形状，红色区域和黑色区域为波函数主要分布的区域。可见波函数的分布与势阱的对称性有关。

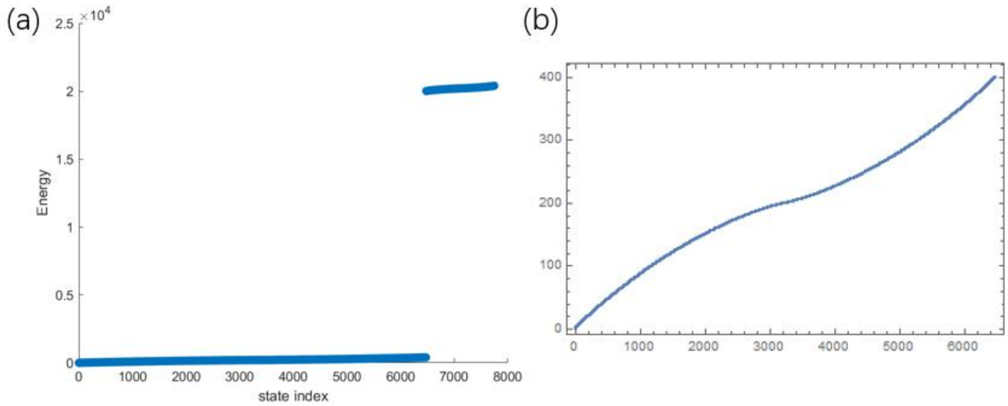

图 8 (a)操场形无限深势阱的能谱；(b)低能级的能谱