解薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi=E\psi$$

(1). $\mathrm{V}(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2, m=1$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi=\left(\frac{2m}{\hbar^2}E\right)\psi$$

令$\mathrm{y}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \mathrm{E}'=\frac{2}{\hbar\omega}E$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+y^2\right)\psi(y)=E'\psi$$

E'的本征值理论值为 1,3,5,7…

$$E_n=\left(n-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \mathrm{n}=1,2,3,\ldots$$

令$\psi_n=\psi(nh), \mathrm{n}=-\frac{\mathrm{L}}{2\mathrm{N}},\ldots,\frac{\mathrm{L}}{2\mathrm{N}}$

$$\mathrm{H}=\left(-\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix}-2 & 1 & \ldots\\ 1 & -2 & \\ \ldots & & \ldots\end{bmatrix}+diag(n^2h^2)\right)$$

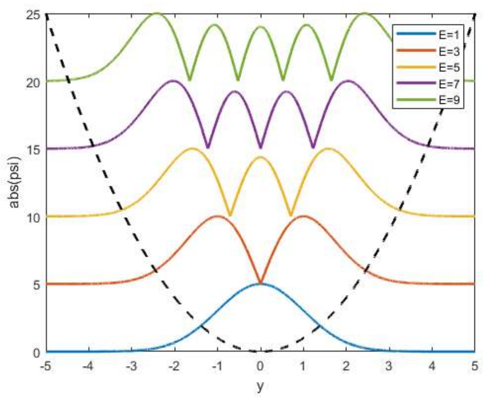
本征值为$\mathrm{eig}(H)$

Matlab code

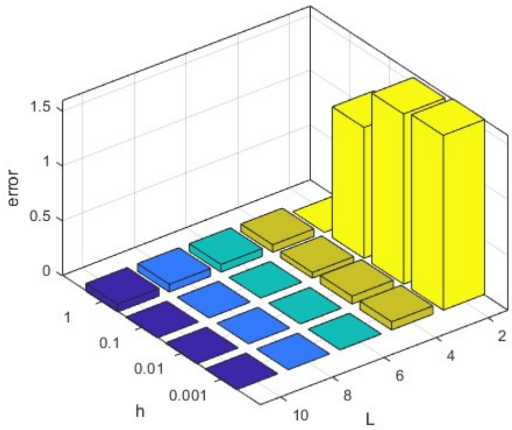
```
L=10;
h=1e-3;


x=-L/2:h:L/2;
N=length(x);
Vx=x.^2;
H=-h^(-2)*(diag(ones(1,N-1),1)+diag(ones(1,N-1),-1)-
2*diag(ones(1,N)))+diag(Vx);
EIG=eig(H);
eig15=EIG(1:5);
```

取 L=8, h=1e-3，前五个本征值和本征函数如下图（本征函数归一化且加了偏移）



以下为基态本征能量的误差与 L 和 h 的关系



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

a) 同理令$\mathrm{y}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \mathrm{E}'=\frac{2}{\hbar\omega}E, A'=\frac{2A}{\hbar\omega}, k'=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}k$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+y^2+A'\cos(k'y+\theta)\right)\psi(y)=E'\psi$$

令$\psi_n=\psi(nh), \mathrm{n}=-\frac{\mathrm{L}}{2\mathrm{N}},\dots,\frac{\mathrm{L}}{2\mathrm{N}}$

$$\mathrm{H}=\left(-\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix}-2 & 1 & \dots \\ 1 & -2 & \\ \dots & & \dots\end{bmatrix}+diag(n^2h^2+A'\cos(k'nh+\theta))\right)$$

Matlab code:

```
L=8;
h=1e-3;
A=.1;
k=1;
theta=1;

x=-L/2:h:L/2;
N=length(x);
Vx=x.^2+A*cos(k*x+theta);
H=-h^(-2)*(diag(ones(1,N-1),1)+diag(ones(1,N-1),-1)-
2*diag(ones(1,N)))+diag(Vx);
EIG=eig(H);
eig15=EIG(1:5);
```

b) 在微扰下

$$y^2+A'\cos(k'y+\theta)=\left(1-\frac{1}{2}A'\cos(\theta)\,k'^2\right)y^2-A'\sin(\theta)\,k'y+A'\cos(\theta)$$

$$=B(y-y_0)^2+C$$

其中$\mathrm{B}=1-\frac{1}{2}A'\cos(\theta)\,k'^2, \mathrm{y}_0=\frac{A'\sin(\theta)k'}{2B}, \mathrm{C}=A'\cos(\theta)-By_0^2$

令$\mathrm{y}'=B^{\frac{1}{4}}(y-y_0), E''=\frac{(E'-C)}{\sqrt{B}}$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+y'^2\right)\psi=E''\psi$$

E''的本征值理论值为 1,3,5,7…

$$E=\hbar\omega\left[C+\sqrt{B}\left(n-\frac{1}{2}\right)\right]$$

$$=\hbar\omega\left[\sqrt{1-\cos(\theta)\frac{k^2}{m\omega^2}A}\left(n-\frac{1}{2}\right)+\cos(\theta)\frac{2}{\hbar\omega}A-\frac{\sin^2(\theta)}{(m\omega^2-A\cos(\theta)\,k^2)}\frac{k^2}{\hbar\omega}A^2\right]$$

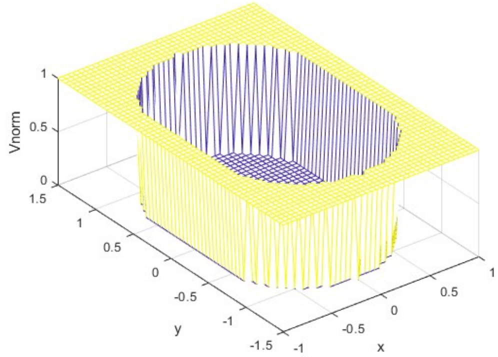
(3). 2D 情况

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi+V\psi=E\psi$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2}[\psi_{i+1j}+\psi_{i-1j}+\psi_{ij+1}+\psi_{ij-1}-4\psi_{ij}]+V_{ij}\psi_{ij}=E\psi_{ij}$$

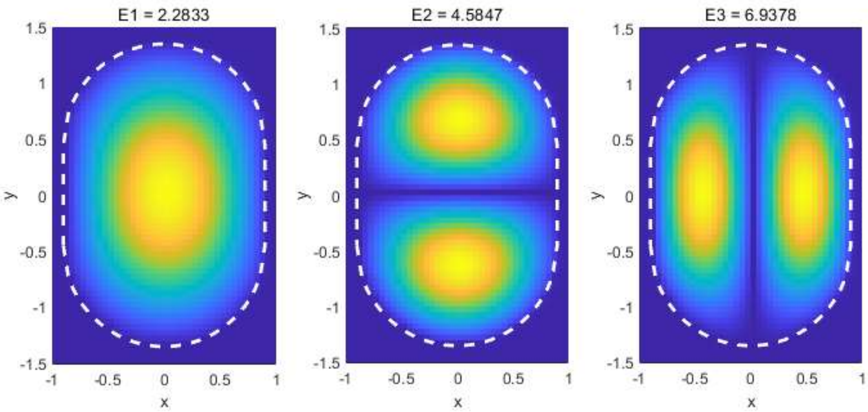
a) 操场

“圆跑道”直径 a=1.8, “直跑道”长度 b=0.9，此时归一化的势场如下



取 h=.05，势垒高度为 VINF=1000，近似为无限高，

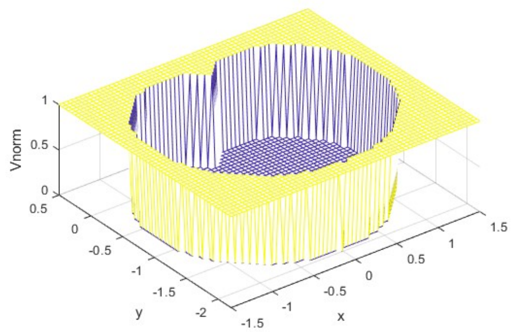
前三个解的波函数和本征值结果如下



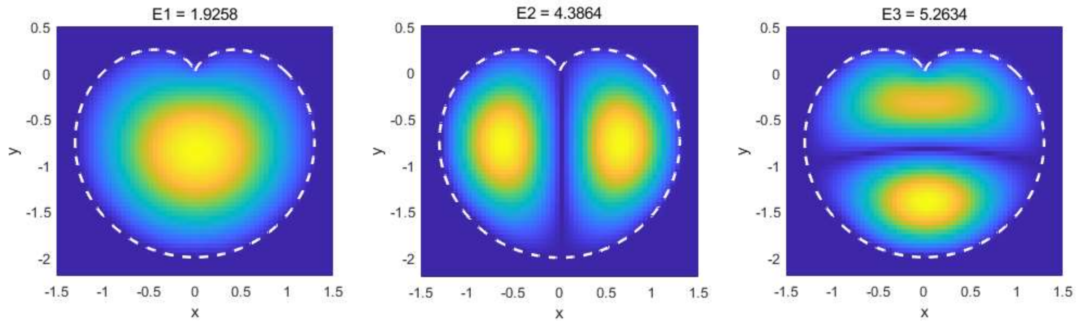
b) 心形线

曲线方程为$\rho=1-\sin\theta$

此时归一化的势场如下



前三个解的波函数和本征值结果如下



代码见附件