小课题 3

对于二维无穷深势阱，半径$\rho = 1$；在圆内，$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \psi\,|_{\partial D} = 0$。取$\hbar = 2m = 1, E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = k^2$。

1. 求解这一本征值问题：$\hat{H}\psi = E\psi$。写出本征值、本征态的表达式。
2. 按本征值从小到大排序，找基矢$\{E_n, \varphi_n(\rho,\theta), n = 1,2,\dots\}$。
3. 增加势场，$V = a*\ \varphi_1(\rho,\theta), a = 1,10,100,\dots\quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V, \psi\,|_{\partial D} = 0$，两种方法求解。a.谱方法、b.有限差分法。对比两种方法得到的本征值和本征态。

结果与讨论

a. 本征值问题求解

其实我们在通用理论中求过了，也就是二维圆形区域齐次Helmholtz方程的解(1st B.C.)，这里就直接改动一下就可以：

$$
\begin{aligned}
&(\Delta+E)u(\rho,\theta)=0, \rho<1; \theta\in[0,2\pi) \\
&u(1,\theta)=0
\end{aligned}
$$

将上面的式子展开并考虑物理的情况：

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho\frac{\partial u}{\partial\rho}) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2} + Eu=0 \\
&u(1,\theta)=0, u(\rho,\theta)|_{\rho=0}\text{有限} \\
&u(\rho,\theta)=u(\rho,\theta+2\pi)
\end{aligned}
$$

令$u(\rho,\theta) = R(\rho)\Phi(\theta)$，轴向方程为：

$$
\begin{aligned}
&\frac{d^2\Phi(\theta)}{d\theta^2} + m^2\Phi(\theta)=0\ ; \\
&\Phi(\theta)=\Phi(\theta+2\pi)
\end{aligned}
$$

在实数域中，其通解可以表示为：

$$
\varphi(m) = \cos m\theta, \sin m\theta\quad m = 0,\pm1,\pm2,\dots
$$

径向方程可以表示为：

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}(\rho\frac{dR(\rho)}{d\rho}) + (E-\ \frac{m^2}{\rho^2})R(\rho)=0 \to Bessel Equation \\
&R(1)=0, R(0)\text{有限}
\end{aligned}
$$

Bessel方程的解为：

$$
R^{(m)}(\rho) = C_m J_m(k\rho) + D_m N_m(k\rho)
$$

将边界条件和物理条件代入可得：

$$
\begin{aligned}
&R(0)\text{有限}\to\ D_m = 0 \\
&R(1)=0\to\quad J_m(\sqrt{E}) = 0
\end{aligned}
$$

因此，这个问题的本征值和本征解为：

$$
\begin{aligned}
&E_n^{(m)} = [x_n^{(m)}]^2, n=1,2,3,\dots \\
&R_n^{(m)}(\rho) = J_m(x_n^{(m)}*\rho), n=1,2,3,\dots
\end{aligned}
$$

综上，这个本征值问题的解是：

$$
\begin{aligned}
&E_n^{(m)} = [x_n^{(m)}]^2, n=1,2,3,\dots \\
&\varphi_n^{(m)} = J_m(x_n^{(m)}*\rho)(c_m\cos m\theta + d_m\sin m\theta), n=1,2,3,\dots and\, m=0,\pm1,\pm2,\dots
\end{aligned}
$$

b. 本征值排序

	1	2	3	4	5	6	7	8
eigenvalue	2.404826	3.831706	5.135622	5.520078	6.380162	7.015587	7.588342	8.417244
solution	$J_0(x_1^{(0)}\rho)$	$J_1(x_1^{(1)}\rho)(c_1cos(\theta)+d_1sin(\theta))$	$J_2(x_1^{(2)}\rho)(c_2cos(2\theta)+d_2sin(2\theta))$	$J_0(x_2^{(0)}\rho)$	$J_3(x_1^{(3)}\rho)(c_3cos(3\theta)+d_3sin(3\theta))$	$J_1(x_2^{(1)}\rho)(c_1cos(\theta)+d_1sin(\theta))$	$J_4(x_1^{(4)}\rho)(c_4cos(4\theta)+d_4sin(4\theta))$	$J_2(x_2^{(2)}\rho)(c_2cos(2\theta)+d_2sin(2\theta))$
	9	10	11	12	13	14	15	16
eigenvalue	8.653728	8.771484	9.761023	9.936110	10.173468	11.064709	11.086370	11.619841
solution	$J_0(x_3^{(0)}\rho)$	$J_5(x_1^{(5)}\rho)(c_5cos(5\theta)+d_5sin(5\theta))$	$J_3(x_2^{(3)}\rho)(c_3cos(3\theta)+d_3sin(3\theta))$	$J_6(x_1^{(6)}\rho)(c_6cos(6\theta)+d_6sin(6\theta))$	$J_1(x_3^{(1)}\rho)(c_1cos(\theta)+d_1sin(\theta))$	$J_4(x_2^{(4)}\rho)(c_4cos(4\theta)+d_4sin(4\theta))$	$J_7(x_1^{(7)}\rho)(c_7cos(7\theta)+d_7sin(7\theta))$	$J_2(x_3^{(2)}\rho)(c_2cos(2\theta)+d_2sin(2\theta))$

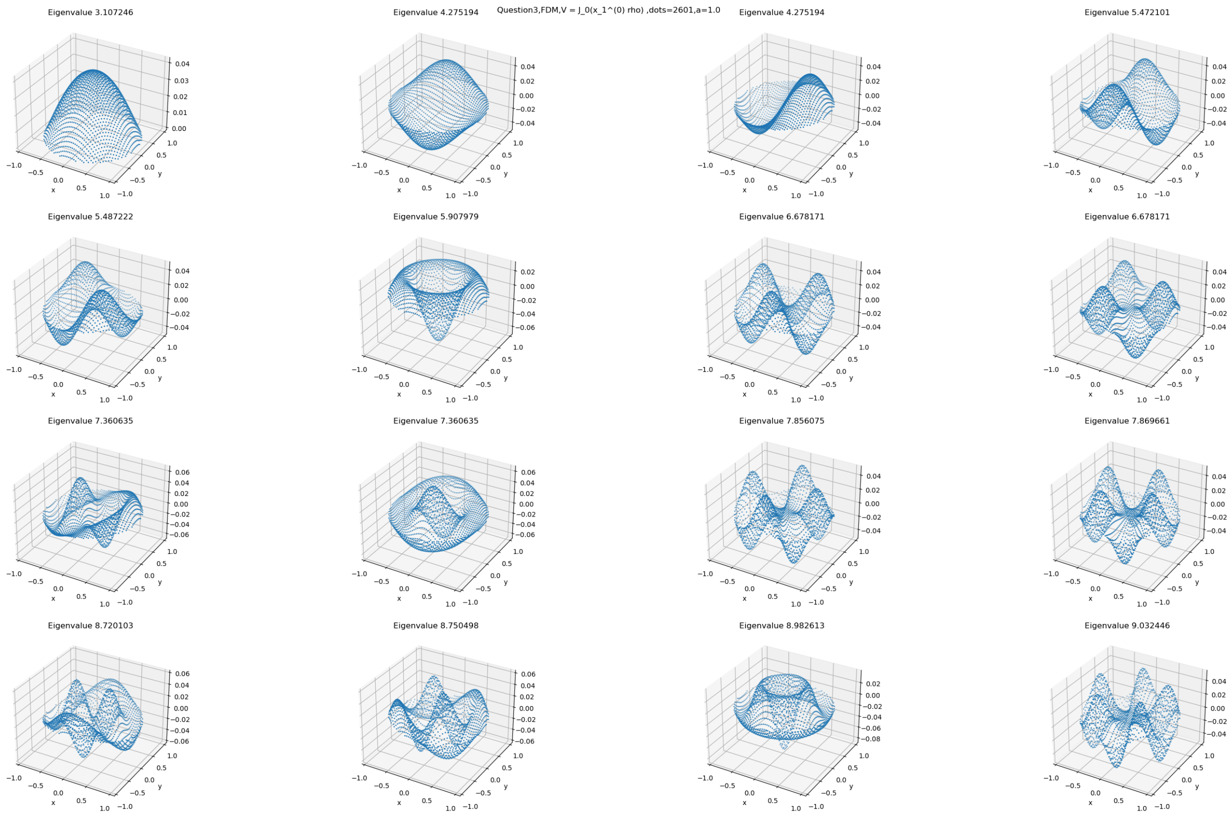
c. 外加势场

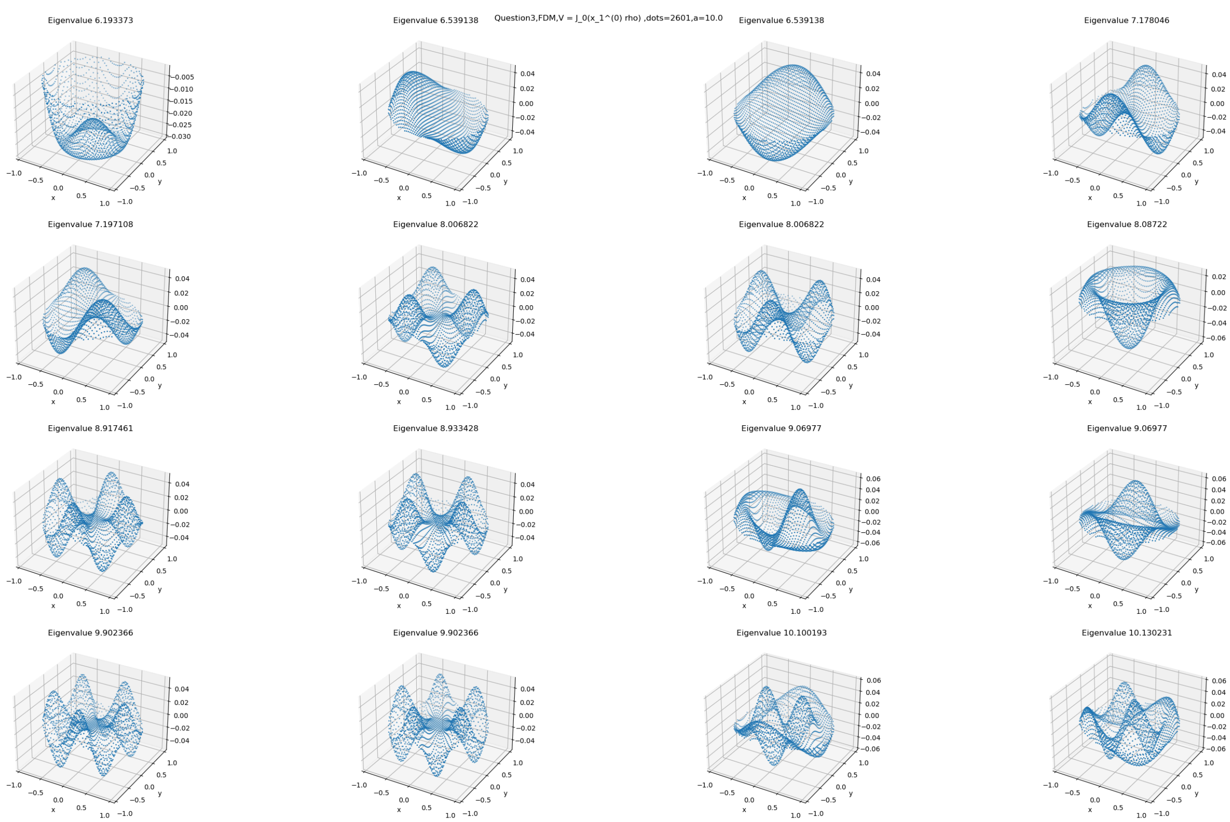
i. 有限差分法

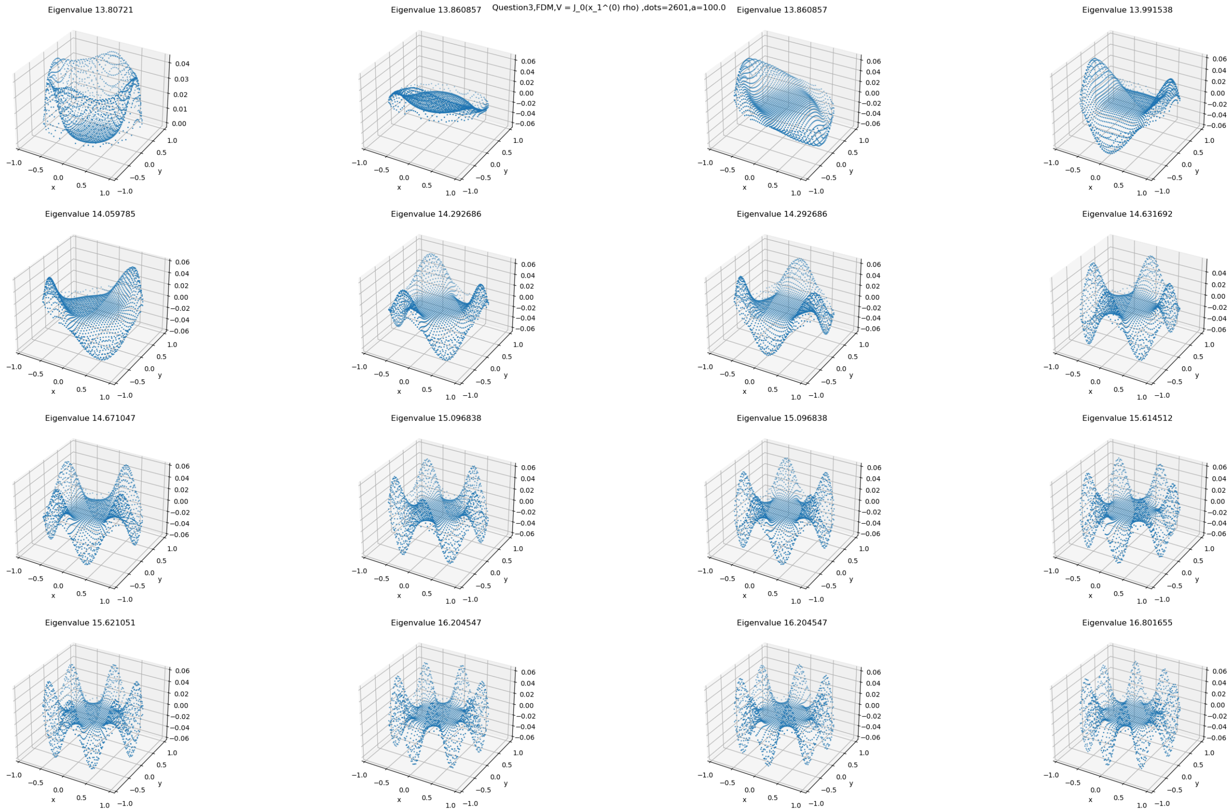
eigenvalues\a_value	1.0	10.0	100.0	1000.0
1	3.107246	6.193373	13.807210	29.810732
2	4.275194	6.539138	13.860857	29.811853
2	4.275194	6.539138	13.860857	29.811853
3	5.472101	7.178046	13.991538	29.812997
3	5.487222	7.197108	14.059785	30.192474
4	5.907979	8.006822	14.292686	30.218311
5	6.678171	8.006822	14.292686	30.218311
5	6.678171	8.087220	14.631692	30.283615
6	7.360635	8.917461	14.671047	30.301275
6	7.360635	8.933428	15.096838	30.405612
7	7.856075	9.069770	15.096838	30.405612
7	7.869661	9.069770	15.614512	30.527790
8	8.720103	9.902366	15.621051	30.577842
8	8.750498	9.902366	16.204547	30.719532

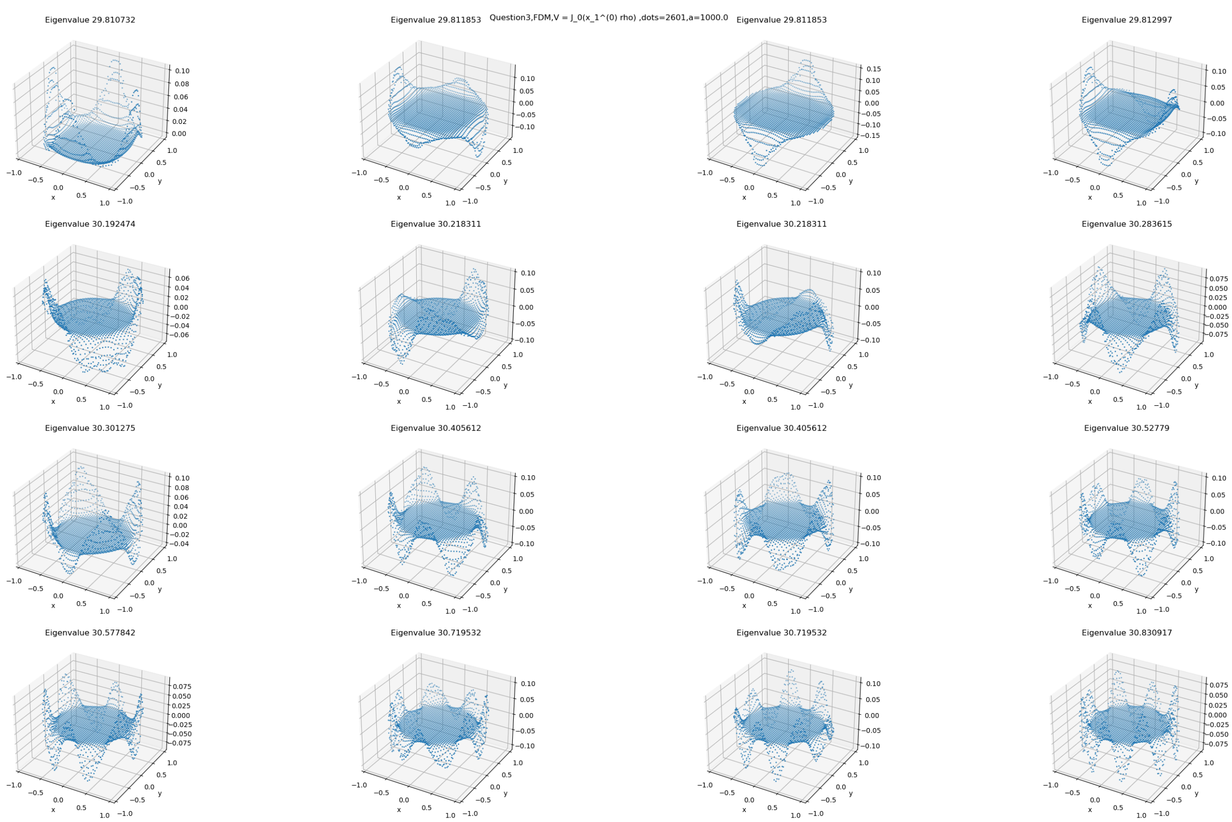
eigenvalues\a_value	1.0	10.0	100.0	1000.0
9	8.982613	10.100193	16.204547	30.719532
10	9.032446	10.130231	16.801655	30.830917

区分不同的图请看标题，上面的a都有对应的图，这里只给出对比性比较强的几个：









我们可以看到，本征值是随a增加而增加的；当a达到一定程度的时候，也就是V起主导作用时，中心的势场较大，本征态对应的值就比较小。

ii.谱方法

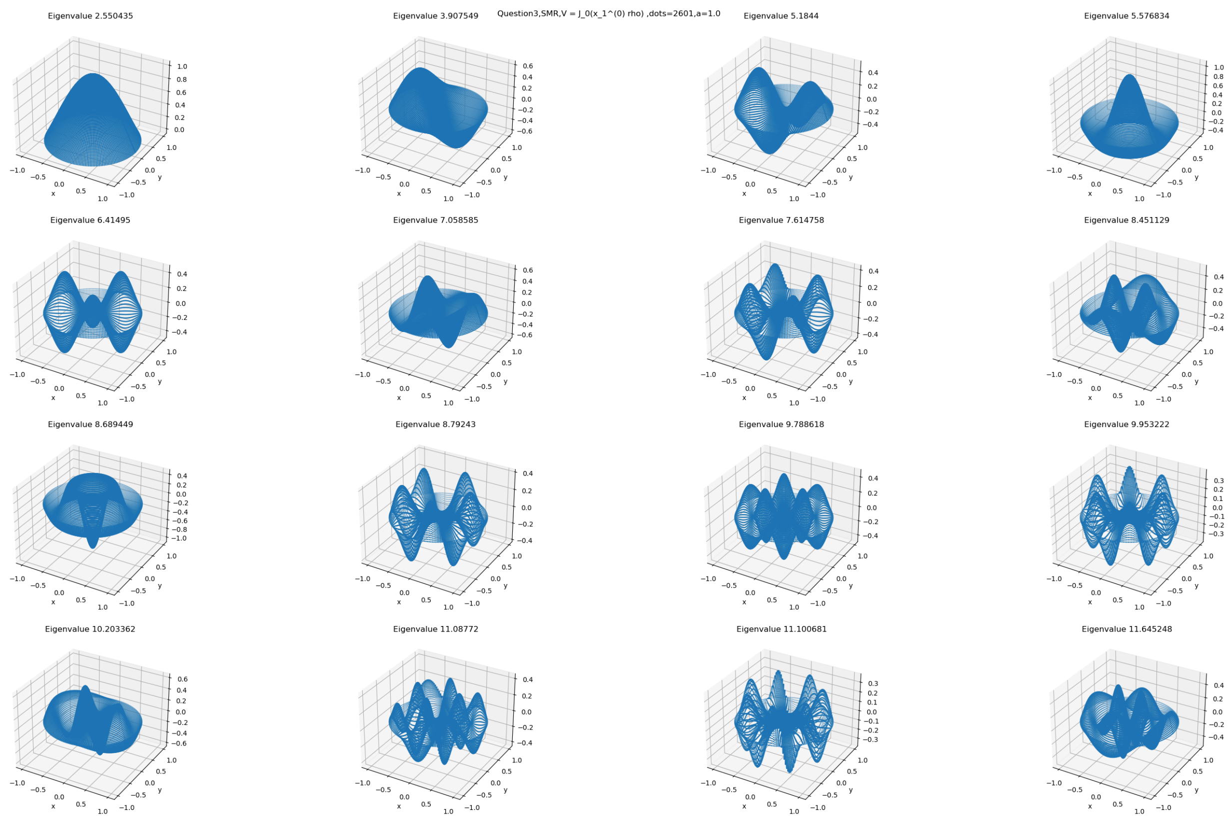
这里的公式和通用理论给出的结果不太一样，但是原理是一样的；因此我们直接给出结论：

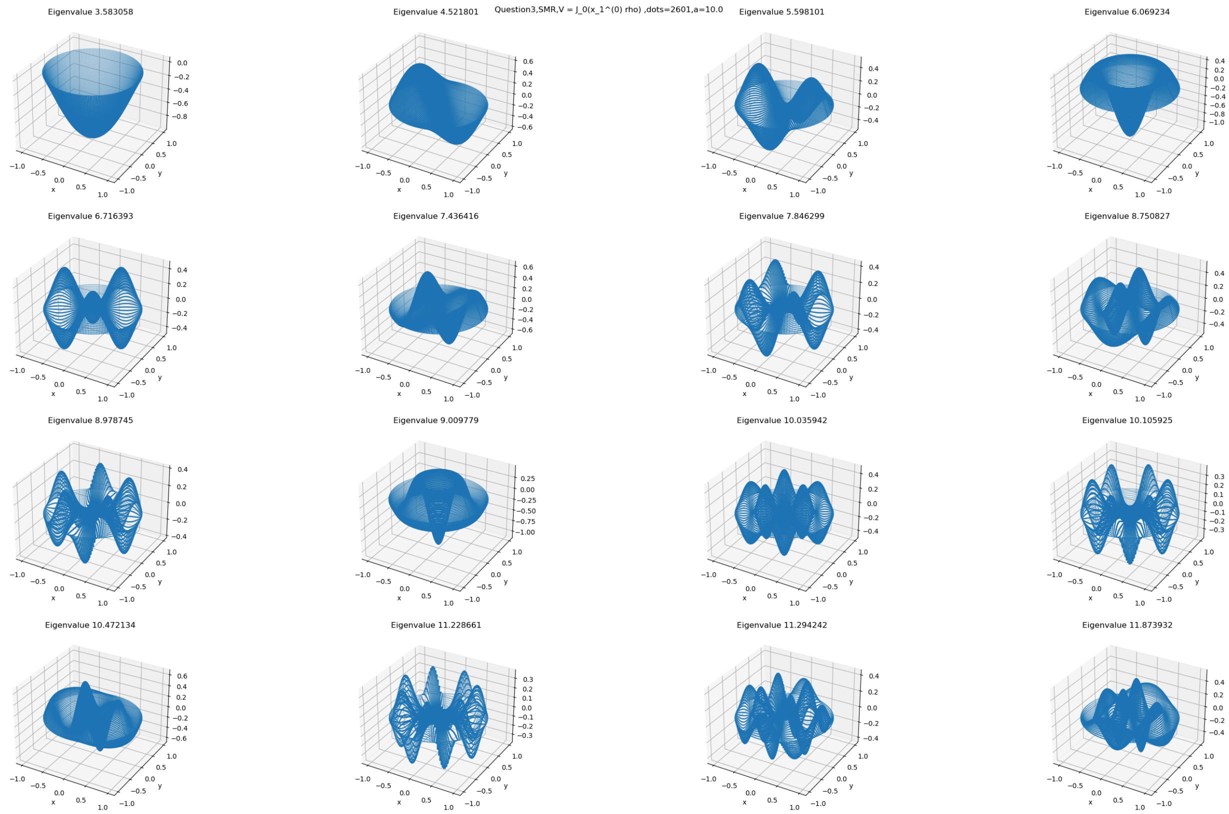
$$M_{mn} * \widetilde{k_n^2} \to M'_{mn} = \left\langle \varphi_m, (\widetilde{k_n^2} + V(x))\varphi_n(x) \right\rangle$$

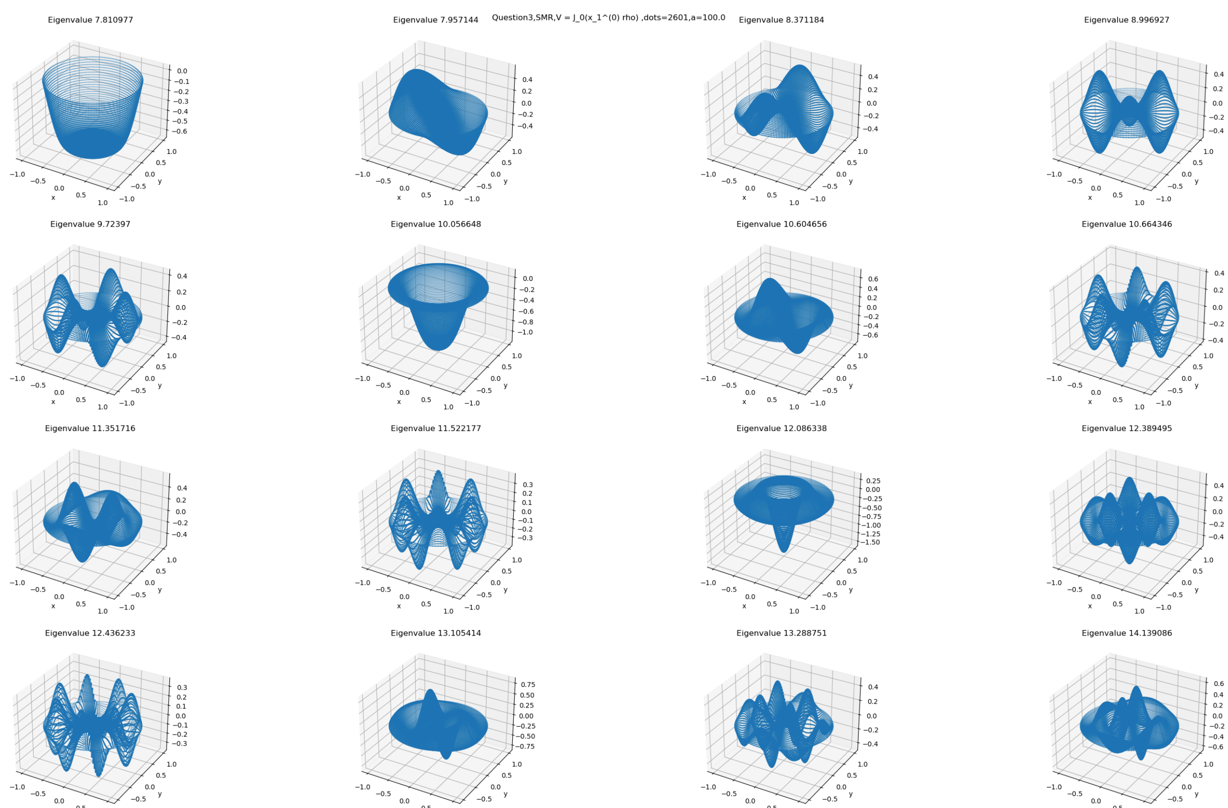
对于本题，V不含θ项，因此不需要使用重积分。

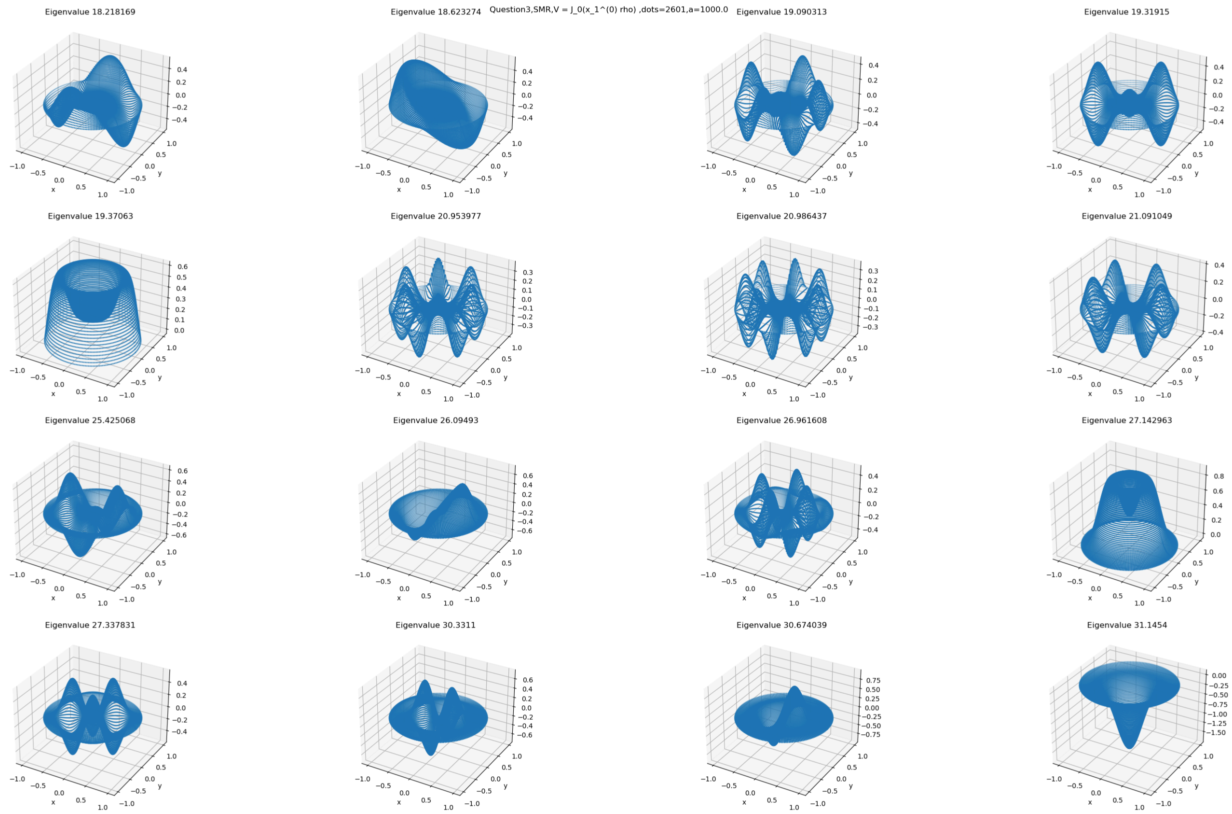
eigenvalues\a_value	1.0	10.0	100.0	1000.0
1	2.550435	3.583058	7.810977	18.218169
2	3.907549	4.521801	7.957144	18.623274

eigenvalues\a_value	1.0	10.0	100.0	1000.0
2	5.184400	5.598101	8.371184	19.090313
3	5.576834	6.069234	8.996927	19.319150
3	6.414950	6.716393	9.723970	19.370630
4	7.058585	7.436416	10.056648	20.953977
5	7.614758	7.846299	10.604656	20.986437
5	8.451129	8.750827	10.664346	21.091049
6	8.689449	8.978745	11.351716	25.425068
6	8.792430	9.009779	11.522177	26.094930
7	9.788618	10.035942	12.086338	26.961608
7	9.953222	10.105925	12.389495	27.142963
8	10.203362	10.472134	12.436233	27.337831
8	11.087720	11.228661	13.105414	30.331100
9	11.100681	11.294242	13.288751	30.674039
10	11.645248	11.873932	14.139086	31.145400




Question3,SMR,V = J_0(x_1^(0) rho) ,dots=2601,a=10.0
Eigenvalue 3.583058
Eigenvalue 4.521801
Eigenvalue 5.598101
Eigenvalue 6.069234
Eigenvalue 6.716393
Eigenvalue 7.436416
Eigenvalue 7.846299
Eigenvalue 8.750827
Eigenvalue 8.978745
Eigenvalue 9.009779
Eigenvalue 10.035942
Eigenvalue 10.105925
Eigenvalue 10.472134
Eigenvalue 11.228661
Eigenvalue 11.294242
Eigenvalue 11.873932


Question3,SMR,V = J_0(x_1^(0) rho) ,dots=2601,a=100.0
Eigenvalue 7.810977
Eigenvalue 7.957144
Eigenvalue 8.371184
Eigenvalue 8.996927
Eigenvalue 9.72397
Eigenvalue 10.056648
Eigenvalue 10.604656
Eigenvalue 10.664346
Eigenvalue 11.351716
Eigenvalue 11.522177
Eigenvalue 12.086338
Eigenvalue 12.389495
Eigenvalue 12.436233
Eigenvalue 13.105414
Eigenvalue 13.288751
Eigenvalue 14.139086



对比两种方法得到的结果，我们可以发现在a比较小的时候两种方法符合的比较好，后面就不行了。我感觉吧，主要的问题还是谱方法选取的本征态的个数太少了，只有16个；但是列出来更多的解需要的工作量还是很大的，从中我们可以方便的比较两种方法的优缺点，谱方法在数值方面的表现型不是很好，无论是从时间复杂度上还是算法的精确性上。