

## 量子世纪年

## 从单粒子到多体系统：精确对角化在计算物理教学中的实践

邬汉青 姚道新

(中山大学物理学院, 广东 广州 510275)

**摘要** 精确对角化是求解量子力学问题最直观的数值方法, 广泛应用于少体与多体系统, 是计算物理课程的核心内容之一。本文基于“由浅入深”的教学理念, 系统介绍了如何在本科计算物理课程中讲授精确对角化方法: 从单粒子系统出发, 逐步拓展至多体量子系统。通过一系列精心设计的教学示例, 学生不仅掌握了基矢选取、对称性使用、矩阵构建与对角化等关键步骤, 也深入理解了该方法的优势与局限。这一教学过程有效衔接了量子力学形式体系与前沿多体数值方法, 为学生后续学习密度矩阵重整化群、张量网络等高级多体计算方法奠定了坚实基础。

**关键词** 精确对角化; 量子力学; 定态薛定谔方程; 多粒子系统; 多体基

## FROM SINGLE PARTICLES TO MANY-BODY SYSTEMS: THE PRACTICE OF EXACT DIAGONALIZATION IN COMPUTATIONAL PHYSICS TEACHING

WU Hanqing YAO Daoxin

(School of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou, Guangdong 510275)

**Abstract** Exact diagonalization serves as the most intuitive numerical approach for solving quantum problems and is widely applied in both few-body and many-body systems, making it a core component of computational physics curricula. Guided by a scaffolded teaching philosophy that progresses from fundamental to advanced concepts, this paper systematically outlines the instruction of exact diagonalization in undergraduate computational physics courses—beginning with single-particle systems and gradually advancing to quantum many-body systems. Through a series of carefully designed pedagogical examples, students not only master key procedural steps such as basis selection, symmetry utilization, matrix construction, and diagonalization, but also develop a deeper comprehension of the method's strengths and limitations. This instructional framework effectively bridges the formalism of quantum mechanics with cutting-edge many-body numerical techniques, laying a solid groundwork for students' future exploration of advanced many-body computational methods such as the density matrix renormalization group and tensor networks.

**Key words** exact diagonalization; quantum mechanics; stationary Schrödinger equation; many-particle system; many-body basis

收稿日期: 2025-10-27

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(12474248); 中山大学 2024 年度校级教学质量工程项目(教务[2023]207 号)。

通信作者: 邬汉青, wuhanq3@mail.sysu.edu.cn; 姚道新, yaodaos@mail.sysu.edu.cn。

引文格式: 邬汉青, 姚道新. 从单粒子到多体系统: 精确对角化在计算物理教学中的实践[J]. 物理与工程, 2025, 35(6): 5-12, 23.

Cite this article: WU H Q, YAO D X. From single particles to many-body systems: The practice of exact diagonalization in computational physics teaching[J]. Physics and Engineering, 2025, 35(6): 5-12, 23. (in Chinese)

海森堡矩阵力学、薛定谔波动力学和费曼路径积分共同构筑了现代量子力学的理论基石。在量子力学的框架下,力学量被表述为线性算符,其在特定完备基下即呈现为矩阵。该矩阵的本征值对应了力学量所有可能的测量结果,而相应本征态则定义了系统的量子态。因此,求解量子系统的核心,在数学上便归结为求解这些算符(或矩阵)的本征值问题。这一深刻认识,直接催生了精确对角化这一强大的数值方法。从理念上看,精确对角化可视为海森堡矩阵力学思想的自然延伸与具体化:它将复杂的量子力学问题转化为一个矩阵的构建与对角化过程。通过直接求解该矩阵的全部或部分本征值和本征波函数,我们便能“精确”地获得系统的基本特性。可以说,精确对角化就是将矩阵力学的理论框架,转化为解决具体量子问题的一个核心计算工具箱。

本文旨在探讨如何在计算物理课程中系统讲授精确对角化方法。课程设计遵循由浅入深、从简单到复杂的教学原则,通过示例程序引导学生掌握方法精髓,培养其解决更复杂物理问题的能力。首先,我们将从单粒子量子力学问题入手,从一维无限深方势阱的解析解出发,进而讨论当势阱底部势能发生改变时,如何运用精确对角化方法进行求解,包括基矢的选取与对称性的利用等关键步骤。其次,将问题扩展至多全同粒子情形,介绍多体基矢的构建方法与实际计算策略。课程内容将逐步深入至多体系统、二次量子化以及相关前沿科学问题,实现课堂知识与科研前沿的有机衔接,从而激发学生的学习积极性。

文章内容已成功应用于中山大学物理学院“计算物理”本科课程的教学实践中。通过将理论讲解、示例程序演示与上机实践操作有机结合,课程有效提升了学生对量子力学相关内容的理解深度与运用能力。学生不仅能够掌握数值方法的基本原理,更能举一反三,将其灵活运用于毕业论文课题及科研项目中,处理更为复杂的物理问题,提升了应用能力和科学计算素养。

需要说明的是,限于篇幅,本文主要讨论一维束缚势阱中的厄密量子力学系统,且聚焦于定态问题的求解。

## 1 精确对角化方法基本框架

在量子力学中,一个系统的动力学由其所对应的力学量算符描述,其中核心是哈密顿量算符 $\hat{H}$ 。以典型的一维单粒子系统为例,其在坐标表象下的单体哈密顿量由动能项与势能项构成,其表达式为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \quad (1)$$

量子体系的希尔伯特空间通常是无穷维的,但计算机无法直接处理无穷矩阵的对角化问题。因此,实现精确对角化的首要步骤是截断:即选取有限个(例如 $l$ 个)线性无关基矢来近似张成一个子空间

$$\begin{aligned} \text{单粒子基: } & |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle, \dots \xrightarrow{\text{坐标表象}} \varphi_1(x), \varphi_2(x), \varphi_3(x), \dots \\ \text{多粒子基: } & |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle, \dots \xrightarrow{\text{坐标表象}} \Psi_1(x_1, x_2, \dots), \Psi_2(x_1, x_2, \dots), \Psi_3(x_1, x_2, \dots), \dots \end{aligned} \quad (2)$$

对于单粒子问题,我们选取单粒子基;对于多体问题,则需选取相应的多粒子基(或多体基)。在选定基矢后,我们可将目标本征态 $|\psi_n\rangle$ 在这组基矢下线性展开,比如分子轨道的计算可以利用原子轨道的线性组合来计算。若不事先选定具体表象,该过程可统一由狄拉克符号表示

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= \sum_{k=1}^l c_k |\varphi_k\rangle, \hat{H} |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle \\ \hat{H} \sum_{k=1}^l c_k |\varphi_k\rangle &= E \sum_{k=1}^l c_k |\varphi_k\rangle \\ \sum_{k=1}^l c_k \langle \varphi_{k'} | \hat{H} | \varphi_k \rangle &= E \sum_{k=1}^l c_k \langle \varphi_{k'} | \varphi_k \rangle \\ \sum_{k=1}^l H_{k'k} c_k &= E \sum_{k=1}^l S_{k'k} c_k \Rightarrow \mathbf{H}\mathbf{c} = \mathbf{E}\mathbf{S}\mathbf{c} \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $\mathbf{H}$ 为哈密顿量矩阵,列向量 $\mathbf{c}$ 即为所求的本征向量,其向量元素是将本征态 $|\psi_n\rangle$ 按基矢组展开时的叠加系数。若选取的基矢是正交归一的,则重叠矩阵( $\mathbf{S}$ 矩阵)为单位矩阵,问题简化为标准的本征值方程;若基矢非正交,则 $\mathbf{S}$ 矩阵即为基矢间的重叠矩阵,此时问题转化为广义本征值方程<sup>[1]</sup>。在此基础上,可将哈密顿量在所选基组下展开为一个有限大小的矩阵(例如 $l \times l$ 维),其矩阵元可表示为

$$H_{mn} = \langle \varphi_m | \hat{H} | \varphi_n \rangle \xrightarrow{\text{坐标表象}} \int \varphi_m^*(x) \hat{H} \varphi_n(x) dx$$

$$H_{mn} = \langle \Psi_m | \hat{H} | \Psi_n \rangle \xrightarrow{\text{坐标表象}} \int \Psi_m^*(x_1, x_2, \dots) \hat{H} \Psi_n(x_1, x_2, \dots) dx \quad (4)$$

在完成矩阵构建后,我们便可采用 QR 方法<sup>[2]</sup>、Lanczos 算法<sup>[3]</sup>等进行对角化,以获取系统的低能本征谱及相应的本征波函数,进而计算其他物理量。为确保结果的精确性,需通过增大基矢选取的数目  $l$ ,通过后验误差估计方法,观察能量与本征波函数的收敛情况,从而确定合适的截断大小。

这种基于有限个基矢展开、并通过逐步增加基矢数目使基态能量等收敛的方法,其理论基础是量子力学中的变分原理。严格来说,体系的真实波函数一般需要由无穷多个线性无关的基函数展开,而使用有限基矢所构造的波函数则是一种近似。根据变分原理,对于任意一个试探波函数  $|\psi\rangle$ ,其能量期望值(称为 Rayleigh-Ritz 商)

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (5)$$

必定不小于真实的基态能量,从而给出基态能量的一个上界。若将试探波函数表示为一组已知线性无关基函数的线性组合

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^l c_k |\varphi_k\rangle \quad (6)$$

则寻找最优波函数的问题就转化为确定组合系数  $\{c_k\}$  的优化问题。进一步由极值条件

$$\frac{\partial E(\{c_k\})}{\partial c_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, l \quad (7)$$

可导出如式(3)所示的广义本征值方程。随着基矢数目  $l$  的增加,该能量上界会逐渐下降,并趋于真实的基态能量值。该方法所能达到的结果精度,在理论上由变分原理保证,而在实际数值计算中则受限于计算机算力与舍入误差——这也是其被称为“精确对角化”而非“严格对角化”的原因。

那么,如何确保低能激发态的计算结果也是“精确”的呢?一个常用的策略是利用体系的对称性。例如,若束缚势阱具有空间反演对称性,即可按宇称将基矢划分为偶宇称和奇宇称两组,并分别进行对角化。通常基态属于偶宇称(波函数在原点无节点),第一激发态属于奇宇称(在原点有一个节点)。由于它们分别是各自对称子空间中

能量最低的状态,其收敛性同样受到变分原理的保证。另一种更通用的方法是采用投影正交子空间技术。该方法在已得到精确基态波函数的基础上,通过施密特正交化,构造与基态正交的一组新基矢,并在该正交子空间中进行对角化,所得的最低能量即为第一激发态。类似地,若要计算第  $k$  个激发态,则需在与前  $k-1$  个本征态均正交的子空间中进行对角化。这种做法可有效避免因基矢选择不当而遗漏低能态及简并态,但随着  $k$  增大,计算量也会显著增加。该思路在 Lanczos 等数值方法中被广泛用于计算激发态<sup>[4]</sup>。

值得注意的是,线性无关基矢的选取方式并不唯一。即便增大  $l$ ,若基矢选择不当,基态随基矢个数  $l$  增长的收敛性也可能不理想。反之,如果基矢选取符合低能波函数特征,不仅基态容易收敛,低能激发态也同样可以随着基矢个数  $l$  增大快速趋近精确。因此,如何基于物理直觉与对称性分析来选取高效的基矢,是提升计算效率与精度的关键。

## 2 精确对角化方法求解单粒子体系量子力学问题

### 2.1 有限宽度无限深势阱问题

我们首先以一维无限深方势阱为例进行讨论。考虑一个位于区间  $[-a, a]$  上的有限宽度势阱,其势能函数形式为

$$V(x) = \begin{cases} U(x), & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases} \quad (8)$$

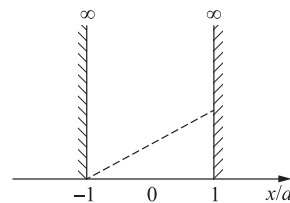


图1 有限宽度无限深势阱示例,其底部是一个线性势

当  $U(x)=0$  时,即为标准的无限深方势阱模型。通过求解该情形下的定态薛定谔方程,我们可以解析地得到其本征能量与本征波函数,它们分别为

$$E_n = \frac{(n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2},$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{(n+1)\pi(x+a)}{2a}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

当  $U(x) \neq 0$  且不为常数时, 系统通常无法严格解析求解。此时, 虽可采用打靶法、有限差分法等数值方法, 但本文将重点介绍如何运用精确对角化方法进行求解。

实现此数值求解的第一步, 是选取一组合适的线性无关基矢。一维无限深方势阱的本征波函数本身满足无限深势阱的边界条件  $\varphi_n(-a) = \varphi_n(a) = 0$ , 因而构成一组理想的正交完备基。我们可以选取其最低的  $l$  个本征态作为基矢, 将哈密顿量在此基组下展开为矩阵形式, 通过对角化该矩阵即可获得近似的低能谱和波函数。通过系统地增大基矢个数或矩阵维度  $l$ , 并观察结果的收敛情况, 便可逐步获得高精度数值解。

在进行具体数值计算前, 为减少舍入误差并提升数值稳定性, 必须对薛定谔方程进行无量纲化处理。我们选择势阱半宽  $a$  作为长度单元, 并引入特征能量  $\epsilon_0 = \hbar^2 / (ma^2)$  作为能量单元。经此变换, 哈密顿量可化为如下无量纲形式

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \hat{u}(r), \quad r = x/a \in [-1, 1],$$

$$\hat{u}(r) = \hat{U}(ar) / \epsilon_0 \quad (10)$$

相应地, 所选取的基矢也必须转换为以无量纲变量表示的形式

$$\varphi_n(r) = \sin \frac{(n+1)\pi(r+1)}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

除了直接采用方势阱的本征波函数作为基矢, 我们原则上也可以考虑其他基函数, 例如形式简单的多项式基  $\{1, r, r^2, r^3, \dots\}$ 。从数学上看, 正弦函数本身可展开为泰勒级数, 似乎此基矢具备一定的表示能力。然而, 这类基矢严重不满足问题所要求的边界条件  $\varphi_n(\pm 1) = 0$ , 导致其在展开真实波函数时收敛缓慢, 并非高效的选择。同样, 自由的平面波基矢也存在边界条件不匹配的问题, 除非将其组合成驻波形式, 而这本质上又回归到了方势阱的本征函数。

针对此边界条件的特点, 我们还可以专门设计满足条件的基组形式, 例如  $\phi_n(r) = r^n(r-1)(r+1)$ , 其中  $n = 0, 1, 2, \dots$ <sup>[1]</sup>。这类基组在构造上即强制满足边界条件, 但其缺点在于彼此不正交, 因此在求解时需要采用广义对角化方法。为直观比较不同基矢的效能, 下文将以无限深线性底势阱  $U(x) = \epsilon_0 x/a$  (即其无量纲形式  $u(r) = r$ ) 为例, 具体展示并对比使用上述两种基组所得的数值结果。两组

基计算得到的哈密顿量的矩阵元公式为

$$H_{mn}^{\varphi} = \int_{-1}^1 \varphi_m^*(r) \hat{h} \varphi_n(r) dr$$

$$= \begin{cases} \frac{(1+n)^2 \pi^2}{8}, & m = n \\ \frac{4}{\pi^2} \left[ \frac{1}{(m+n+2)^2} - \frac{1}{(m-n)^2} \right], & m \neq n, m+n \in \text{奇数} \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (12)$$

$$H_{mn}^{\phi} = \int_{-1}^1 \phi_m^*(r) \hat{h} \phi_n(r) dr$$

$$= \begin{cases} \frac{2(n+2)(n+1)}{(m+n+3)(m+n+1)} - \frac{2n(n-1)}{(m+n+1)(m+n-1)}, & m+n \in \text{偶数} \\ \frac{2}{m+n+6} - \frac{4}{m+n+4} + \frac{2}{m+n+2}, & m+n \in \text{奇数} \end{cases}$$

$$S_{mn}^{\phi} = \int_{-1}^1 \phi_m^*(r) \phi_n(r) dr$$

$$= \begin{cases} \frac{16}{(m+n+5)(m+n+3)(m+n+1)}, & m+n \in \text{偶数} \\ 0, & m+n \in \text{奇数} \end{cases} \quad (13)$$

对角化哈密顿量矩阵既可以得到本征能量和本征波函数, 通过系统增大截断数  $l$  并利用后验误差估计, 我们可以进一步判断能量与本征函数的收敛情况。根据图 2 所示结果, 可以得出以下对比结论: 一方面, 采用非正交基  $\{\phi_n(r)\}$  的收敛速度较快, 能在较小的  $l$  下获得较高精度的低能态, 这是因为基组符合低能波函数结构。数值验证表明三个归一化后的波函数满足正交性。然而, 随着  $l$  增大, 基矢之间可能越来越趋近线性相关, 其重叠矩阵  $S$  与哈密顿矩阵  $H$  的条件数会迅速恶化, 导致矩阵趋于奇异, 使得对角化计算在  $l$  较大时无法进行, 从而难以计算更高能量的激发态。另一方面, 虽然正交基  $\{\varphi_n(r)\}$  的收敛速度相对较慢, 但其数值稳定性显著更优, 能够支持  $l > 20$  更大规模对角化计算而不会出现奇异问题。因此, 正交基更适合于需要计算更多能级和本征波函数的应用场景。

## 2.2 谐振子类势阱问题

考虑  $|x| \rightarrow \infty, V(x) \rightarrow \infty$  这类势阱, 如谐振子

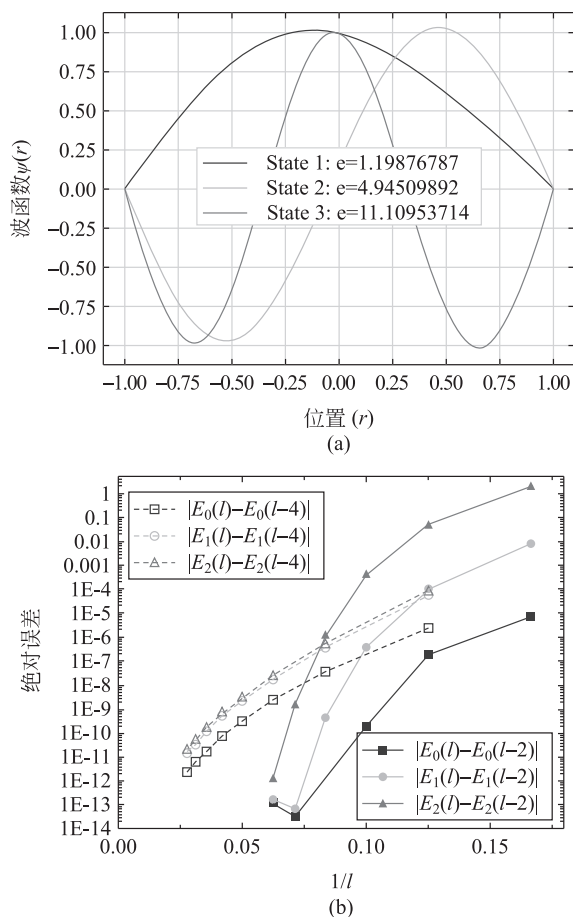


图2 无限深线性势阱低能本征值问题的计算与分析  
(a) 三个低能本征波函数与对应的精确本征能量; (b) 基于两种不同基组计算的前三个低能态本征能量的后验绝对误差随基组规模  $l$  的收敛特性对比

### 势阱

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (14)$$

对这类问题,其数值处理首先面临无量纲化中特征长度不直观的问题。为此,我们可以优先选定系统的特征能量,例如选取  $\hbar\omega$ 。利用谐振子的特征能量关系  $\hbar\omega = \hbar^2/(ma^2)$ ,可以反解出特征长度  $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ 。基于此,我们即可将哈密顿量化为简洁的无量纲形式

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} \hat{r}^2 \quad (15)$$

在基矢的选取上,需满足波函数在无穷远处趋于零的边界条件,我们可以选择形式为  $\varphi_n(r) = r^n \exp(-ar^2)$  的基函数,  $a$  为可调节常量。此类基组不仅能天然满足边界条件,更关键的是,在计算哈密顿量的矩阵元时,可以利用高斯积分进行严

格的解析计算,从而保证数值的精确性与计算的高效性。事实上,一维谐振子的严格解波函数正包含埃尔米特多项式  $H_n(r)$ ,即

$$\psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}r^2} H_n(r) \quad (16)$$

将埃尔米特多项式  $H_n(r)$  展开即包含基组函数结构,这表明我们选取的基矢形式能够精确描述此类系统。鉴于谐振子问题已有解析解,本文将不对此进行对角化计算,而是转而聚焦于更具复杂性与物理内涵的双势阱问题,如图3中黑色线所示。

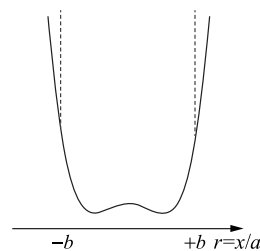


图3 双势阱示意图,灰色虚线表示假想的无穷势阱壁

$$V(x) = -\beta \frac{x^2}{2} + \beta\lambda \frac{x^4}{4} \quad (17)$$

参数  $\beta$  和  $\lambda$  的取值由所模拟的实际物理体系决定。与谐振子情形类似,我们首先进行无量纲化:选取  $\hbar\omega = \hbar^2/(ma^2) = \sqrt{\beta/m}$  作为能量单位,并相应地确定长度单位  $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ ,从而将哈密顿量转化为无量纲形式

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{2} \hat{r}^2 + \frac{1}{4} f \hat{r}^4, \quad f = \lambda a^2 \quad (18)$$

参数  $f$  的取值同样依赖于具体的体系参量。为便于演示,下文我们取  $f=1$  进行计算。在此前提下,我们将尝试采用基组  $\varphi_n(r) = r^n \exp(-ar^2)$  对该体系进行精确对角化计算。在这组基矢下,哈密顿量矩阵元及基组之间的重叠矩阵为

$$H_{mn} = \int_{-1}^1 \varphi_m^*(r) \hat{h} \varphi_n(r) dr = \begin{cases} (2\alpha)^{\frac{m+n+1}{2}} \left[ -\alpha n(n-1) \Gamma\left(\frac{m+n-1}{2}\right) + \alpha(1+2n) \Gamma\left(\frac{m+n+1}{2}\right) - \left(\alpha + \frac{1}{4\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{m+n+3}{2}\right) + \frac{1}{16\alpha^2} \Gamma\left(\frac{m+n+5}{2}\right) \right], & m+n \in \text{偶数} \\ 0, & m+n \in \text{奇数} \end{cases}$$

$$S_{mn} = \int_{-1}^1 \varphi_m^*(r) \varphi_n(r) dr$$

$$= \begin{cases} (2\alpha)^{-\frac{m+n+1}{2}} \Gamma\left(\frac{m+n+1}{2}\right), & m+n \in \text{偶数} \\ 0, & m+n \in \text{奇数} \end{cases} \quad (19)$$

其中,  $\Gamma$  为伽玛函数。图 4(a) 展示了通过对角化计算得到的三个最低本征能量及其对应的波函数。而图 4(b) 则描绘了这三个本征能量随基矢数目(即矩阵维度)增加的后验误差收敛情况。对比不同参数  $\alpha$  的结果可以发现, 当  $\alpha$  被调节至 1.0 时(图中以空心和虚线标示), 其收敛速度明显快于  $\alpha=0.5$  的情况(图中以实心和实线标示)。我们也利用有限差分方法交叉验证了对角化得到的本征能量和波函数的精确性。

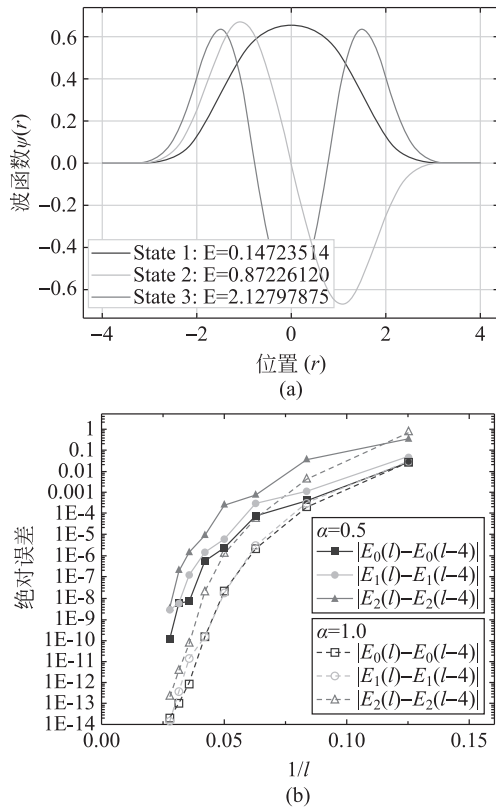


图 4 一维双势阱定态本征值问题的计算与分析

(a) 一维双势阱定态薛定谔方程的三个低能本征波函数及相应的本征能量; (b)  $\alpha$  取 0.5 和 1.0 时, 三个本征能量关于基矢个数  $l$  的后验绝对误差估计

那么, 能否利用无限深方势阱的本征波函数作为基矢来求解双势阱问题呢? 答案是肯定的。其可行性基于以下原理: 若我们将双势阱置于一个足够宽的无限深势阱  $[-b, b]$  内部(如图 3 灰色

虚线所示), 则该模型在数学上等效于求解一个底部具有双势阱形式的无限深势阱问题。只要选取的宽度  $b$  足够大(可以不断增大  $b$ ), 使得我们所关心的低能本征态在边界  $|r|=b$  处已衰减至数值误差可忽略的程度, 那么此无限深底部双势阱模型下的低能本征解就可以精确接近双势阱问题的真实解。因此, 我们可以直接采用  $[-b, b]$  区间上的无限深方势阱本征态作为基矢, 对双势阱问题执行精确对角化计算。此时要注意能量单元依然需要选取  $\hbar\omega = \hbar^2/(ma^2) = \sqrt{\beta/m}$ , 相应地保持长度单元  $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  在整个过程中不改变。这个基组做法随  $l$  的收敛性要比  $\varphi_n(r) = r^n \exp(-\alpha r^2)$  基组慢, 原因和结果对比可以留给学生课后作业进一步探讨。

### 3 精确对角化方法求解多粒子体系量子力学问题

#### 3.1 无相互作用体系

我们以一维无限深方势阱中的两个无相互作用粒子为例进行探讨。此时, 确定系统的能级和本征波函数, 其核心在于如何根据粒子的全同性原理与自旋-统计关系, 将两个粒子填充到单粒子能级上。由于粒子间无相互作用, 多体波函数可直接由单粒子波函数构造, 而体系的总能量则为各粒子占据能级能量之和。对于不同类型的粒子, 其基态波函数的构造方式如下。

(1) 自旋为 0 的玻色子

$$\Psi_G^B(x_1, x_2) = \varphi_0(x_1) \varphi_0(x_2) \quad (20)$$

(2) 自旋极化(两粒子自旋平行排列)的费米子

$$\Psi_G^F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0(x_1) \varphi_1(x_2) - \varphi_1(x_1) \varphi_0(x_2))$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_0(x_1) & \varphi_0(x_2) \\ \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) \end{vmatrix} \quad (21)$$

(3) 自旋 1/2 的费米子

$$\Psi_G^F(x_1 \sigma_1, x_2 \sigma_2)$$

$$= \varphi_0(x_1) \varphi_0(x_2) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_0(x_1)\alpha(1) & \varphi_0(x_2)\alpha(2) \\ \varphi_0(x_1)\beta(1) & \varphi_0(x_2)\beta(2) \end{vmatrix} \quad (22)$$

基于上述构造方法, 我们可以类似地写出其他激发态的两粒子波函数。将此规则推广至多粒子体系; 对于无相互作用的费米子, 其多体波函数可由

单粒子波函数构成 Slater 行列式,以保证波函数的反对称性;而对于玻色子,则对应地由单粒子波函数构成对称情形

$$\begin{aligned}\phi_i(x, \sigma) &= \varphi_k(x) \alpha, \sigma = \uparrow, \\ \phi_{i+1}(x, \sigma) &= \varphi_k(x) \beta, \sigma = \downarrow, \\ \Psi_G^F(x_1 \sigma_1; x_2 \sigma_2; \cdots; x_N \sigma_N) &= \\ \frac{1}{\sqrt{N!}} &\begin{vmatrix} \phi_1(x_1, \sigma_1) & \phi_1(x_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_1(x_N, \sigma_N) \\ \phi_2(x_1, \sigma_1) & \phi_2(x_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_2(x_N, \sigma_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(x_1, \sigma_1) & \phi_N(x_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_N(x_N, \sigma_N) \end{vmatrix}\end{aligned}\quad (23)$$

### 3.2 相互作用体系

当需要考虑粒子间的相互作用(如  $\delta$  作用、库仑作用等)时,若采用精确对角化方法求解,则需遵循以下步骤:首先选定一组单粒子基,并在此基础上构造多体基,然后在此多体基下将哈密顿量写成矩阵形式,最后做对角化得到多体波函数和本征能量。原则上单粒子基是无穷的,多体基也是无穷的,因此也必须引入截断。

我们以一维无限深势阱中的两粒子问题为例:首先,选取前  $m$  个方势阱本征态作为单粒子基。其次,根据粒子在这些能级上的所有可能占据方式,按照总能量从低到高的顺序来构造并排序多体基。对于自旋  $1/2$  的费米子体系,我们可以利用总自旋在  $S^z$  轴投影算符  $\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z$  的本征值  $M_z = +1, 0, -1$  对基矢进行分类,如图 5 所示。如果选取的单粒子基数  $m$  确定,由此产生的多体基总数也是确定的,计算公式为  $2m^2 - m$ 。利用这组有限的多体基进行对角化,便可得到近似的低能谱与多体本征态。为逼近真实解,我们需

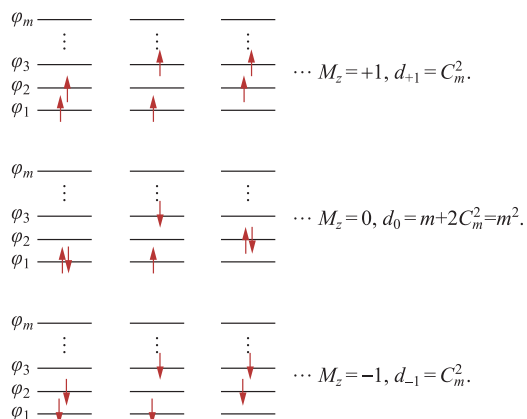


图5 两体基的构成示意图。通过确定两个电子在不同单粒子态上的占据方式,即可定义出不同的两体基矢

要系统性地增加单粒子基的数目  $m$ ,直至所关心的低能物理量(如能谱与波函数)收敛至预期的精度为止。

若所选单粒子基效率低下,将直接导致多体基子空间下能量和波函数收敛缓慢,在有限计算资源下难以获得精确的低能物理信息。为此,一种解决方案是直接更换为针对具体物理体系更优的单粒子基;另一种更精妙的方案则是对现有基矢进行幺正变换或重整化,构造出在能量或多体纠缠意义上“最优”的基组,从而以最少的多体基矢数目实现快速收敛。

然而,精确对角化方法存在一个根本性瓶颈:当体系扩展至  $N$  个粒子时,矩阵维数为  $C_{2m}^N$ ,其计算复杂度与内存需求随粒子数及基矢个数将趋近于指数级增长,即所谓的“指数墙”问题,这严重限制了其处理大系统的能力。如何在这一指数大的希尔伯特或 Fock 空间中,有效地识别出蕴含真实物理(如基态和低能激发态)的微小子空间,已成为现代计算物理的核心挑战。这也催生了密度矩阵重整化群<sup>[5]</sup>、张量网络态<sup>[6-8]</sup>乃至机器学习<sup>[9]</sup>等前沿数值方法。这些方法为学生提供了广阔的探索空间,可通过后续课程及课后调研进行深入了解。

### 4 结语

综上所述,在精确对角化中,基矢的选取虽具灵活性,却直接决定了计算的效率。基于前述讨论,我们可将其选取原则归纳为以下四个方面:

1) 物理适配性原则:优选同类势场的本征态

尽可能选取与目标势场属于同一类型(尤其是边界条件相同)的已知解析解作为基矢。例如,对于任意有限宽度的无限深势阱,无论其底部势形如何变化,取无限深方势阱的本征波函数作为基矢,满足相同的边界条件。因此,该基组是展开此类体系波函数的优良基矢。

2) 对称性利用原则:实现子空间对角化

应充分利用体系的对称性来构造对称化的基矢(如具有确定宇称的基矢),从而将一个大尺度对角化问题分解为多个子空间,这也是很多基于对角化方法计算中提升效率的核心技巧。

### 3) 计算可行性原则:保障矩阵元高效生成

所选基矢应能方便、快速地计算出哈密顿量的矩阵元。这一点至关重要,有时甚至会与第一条原则产生矛盾。例如,对于双势阱问题,虽然谐振子基矢在物理上更具合理性,但其矩阵元的计算涉及埃尔米特多项式的复杂积分,如果只是关心低能本征态,数值效率可能反而不如  $\varphi_n(r) = r^n \exp(-\alpha r^2)$  非正交基矢。当然我们也可以利用数值积分方法来生成所需的哈密顿量矩阵元,这样可以极大扩展基矢的选择方案。

### 4) 多体基构造的前提与基础:单体基的选定

上述原则在应用于多体问题时,其前提是首先需要选定一组用于构造多体基的单体基或局域基。

精确对角化方法作为计算物理教学体系中的重要组成部分,在帮助学生贯通数值计算与量子力学、理解前沿量子问题的复杂性与挑战性方面,具有不可替代的作用。从当前学生的课堂听讲、上机实践及课后反馈来看,他们普遍能够较好地掌握相关知识内容,教学成效显著。笔者在多年教学过程中,也逐步积累了丰富的教学经验,积极推动教学模式创新:一方面,依托“天河二号”超算平台,开展课堂演示与同步上机练习,实现了理论讲授与计算实践的深度融合;另一方面,密切关注人工智能技术的发展趋势,积极有针对性地引入教学改革中,持续提升课程的前沿性与互动性,提高本科生科学计算素养。

### 参 考 文 献

- [1] THIJSSEN J M. Computational physics[M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- [2] PRESS W H, TEUKOLSKY S. A, VETTERLING W T, et al. Numerical recipes: The art of scientific computing [M]. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- [3] LANCZOS C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators[J]. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1950, 45(4): 255-282.
- [4] SANDVIK A W. Computational studies of quantum spin systems[C]. AIP Conference Proceedings. Puerto Rico: AIP, 2010: 135-338.
- [5] WHITE S R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups[J]. Physical Review Letters, 1992,

69(19): 2863-2866.

- [6] ORÚS R. Tensor networks for complex quantum systems [J]. Nature Reviews Physics, 2019, 1(9): 538-550.
- [7] XIANG T. Density matrix and tensor network renormalization[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2023.
- [8] 冉世举. 张量网络[M]. 北京: 首都师范大学出版社, 2022.
- [8] RAN S J. Tensor networks[M]. Beijing: Capital Normal University Press, 2022. (in Chinese)
- [9] 蔡子. 机器学习方法在量子多体物理中的应用[J]. 物理, 2017, 46(9): 590-596.
- CAI Z. Application of machine learning methods in quantum many-body physics[J]. Physics (Beijing), 2017, 46(9): 590-596. (in Chinese)

### 附:审稿人意见及作者回复

#### 审稿专家意见:

该论文讨论了精确对角化方法计算量子力学能量本征态和本征函数,论文对大学物理量子力学教学有一定启发,论文可以在适当修改之后发表。具体意见如下,

(1) 论文例子中基矢的选择有很大的任意性,看上去基本上没有什么原则,完全根据作者的经验。而通常的教材都是选定某个表象的本征矢量,这样基矢量正交归一,会有更清晰的物理意义。如果任意选择,那基矢量不正交,那描写对角化之后的本征矢量就很难表述清楚。作者应该说明选择的标准是什么,就是完全根据经验么?

(2) 我认为论文采用精确对角化的方法,是对有限维数希尔伯特空间基矢全部对角化,这样需要基矢足够多数目才可能对基态、第一、第二激发态由低到高的能量本征态计算比较准确。而对于那些量子数接近于基矢数目的量子态来说,估计误差很大。而且很消耗计算机时。为什么不从基态开始,一个一个往上计算? 此时不用对角化,采用变分(基矢空间撒点,或者马尔科夫链搜寻)得到能量最小值,然后正交波函数撒点得到第一激发态,以此类推。这样前面几个能级计算是比较准确的。估计也节省了计算机时。越往高计算,越不准确。所以对基矢量全部对角化,估计问题很大。因为那些不能精确计算能级影响了下面可以精确计算的能级。

#### 回复审稿意见

感谢审稿人抽空仔细阅读了我们的手稿,并提出建设性意见,这些意见帮助我们进一步改进了论文。下面我们分别针对具体意见一一回复。

(1)答:基矢的选取确实并不唯一,具有一定的任意性,我们已经将基矢的选取原则总结成四

(下转第 23 页)

- 与技术, 2015, 13(6): 1-2.
- ZHAO H, HAO Y J, ZHU J, et al. Study on polarization characteristics of light[J]. Experiment Science and Technology, 2015, 13(6): 1-2. (in Chinese)
- [5] 沈韩, 赵福利, 方奕忠, 等. 结合定量仿真的虚实结合物理实验教学模式[J]. 物理与工程, 2020, 30(5): 102-106.
- SHEN H, ZHAO F L, FANG Y Z, et al. Teaching mode of virtual-physical combined physics experiment integrated with quantitative simulation[J]. Physics and Engineering, 2020, 30(5): 102-106. (in Chinese)
- [6] 郭健鸣, 陈贝贝, 陈晓宇. 虚幻引擎和光线追踪技术在高校数字媒体教学中的应用[J]. 电子技术与软件工程, 2022(23): 83-87.
- GUO J M, CHEN B B, CHEN X Y. Application of unreal engine and ray tracing technology in digital media teaching in colleges[J]. Electronics Technology & Software Engineering, 2022(23): 83-87. (in Chinese)
- [7] 周建华, 兰岚, 杨承. 工程光学基础实验与设计仿真[M]. 北京: 科学出版社, 2018.
- ZHOU J H, LAN L, YANG C. Fundamental experiments and design simulation of engineering optics[M]. Beijing: Science Press, 2018. (in Chinese)

(上接第 12 页)

点放在手稿最后的结语里。基矢选择有点像傅里叶奇数问题, 一个方波原则需要无穷多个正弦波叠加得到, 正弦波有点像我们选的完备基组, 但是由于正弦波不满足方波(类似本征波函数)结构特点, 所以需要大量基矢叠加才能得到精确本征态。如果能选取的基矢就是类似方波结构, 只需要较少几个基矢就能叠加出精确方波形状。限于篇幅, 以及针对本科生教学特点, 我们手稿里主要讨论的是坐标表象, 讨论的问题主要是束缚势阱中量子力学问题。基矢的选择只需满足线性无关即可, 不需要正交。就好比如欧几里得二维空间中可以利用任意两个线性无关(不需要正交)的矢量作为完备基矢(也不需要单位长度)来展开该空间的任一个矢量。只是一般正交单位基我们更常用, 处理起来更方便。利用线性无关的基矢也是可以正确叠加表达本征波函数的。

(2)答: 选择有限个线性无关的基矢, 如果基矢满足薛定谔方程(微分方程)的物理边界条件, 变分原理能够保证基态较快收敛, 如果基矢同时满足低能本征态的结构, 最低的几个低能激发态也是可以很快收敛的, 我们文中展示的例子就可以说明。虽然在一些极端情况, 确实可以出现没法直接保证激发态也收敛(甚至有时候缺失, 特别是能级简并情况), 这时候我们也提出了两个解决方案, 放在新手稿里, 一个是利用对称性分子空间对角化, 而是利用投影正交化子空间方法。因我们这里主要讨论精确对角化, 所以我们不讨论变分蒙特卡罗方案。