广义 Kronecker 符号在薛定谔方程教学中的应用

——《量子力学》课程实践

李克银

（佛山大学 物理与光电工程学院，广东 佛山 528225）

摘要：薛定谔方程是量子力学中的核心方程，但其数值求解在教学中存在一定的挑战。本文提出将广义Kronecker符号引入有限差分法，以优化薛定谔方程的数值解法教学。广义Kronecker符号通过简化计算，帮助学生更直观地理解复杂的矩阵运算和数值求解过程。通过在《量子力学》课程中的实际应用，学生能够更高效地掌握数值解法，提高了对量子力学概念的理解。教学实践表明，广义 Kronecker 符号不仅优化了数值解法的效率，还增强了学生的学习兴趣和实践能力。研究结果为量子力学教学提供了新的方法，拓展了广义 Kronecker 符号在物理学教学中的应用，并为量子力学教学改革提供了实践经验。

关键词：薛定谔方程；广义 Kronecker 符号；教学实践

量子力学作为物理学的基础学科之一，涵盖了从微观粒子行为到宏观物理现象的广泛理论，其核心内容之一便是薛定谔方程。薛定谔方程不仅是量子力学的基础方程，也是描述量子系统演化的数学工具。其解法通常涉及复杂的数学运算，尤其是在实际应用中，当面对多粒子系统或需要数值求解时，薛定谔方程的解析解往往难以获得。因此，掌握有效的数值解法对于深入理解量子力学至关重要。

当前，薛定谔方程的教学主要通过经典的数学方法进行讲解，例如分离变量法、矩阵法等。然而，这些方法在某些情况下并不适用于复杂系统，尤其是当系统的复杂度增加时，解析解变得无法实现。在此背景下，数值解法成了量子力学教学中的一个重要工具。有限差分法作为一种广泛使用的数值求解方法，提供了一种可行的解决方案 [1]。它通过将连续的量子态离散化，从而将薛定谔方程转化为一组代数方程，便于求解。

尽管有限差分法已被成功应用于薛定谔方程的数值解法中，但其教学方法仍有待改进。学生在学习这一方法时，通常会遇到诸如计算精度、稳定性分析等问题。如何有效地将数学工具与物理概念结合起来，使学生能够更直观地理解数值解法的意义，成了《量子力学》教学中的一大挑战。

为了解决这一问题，本文提出了一种新的教学方法，即在有限差分法中引入广义 Kronecker 符号。广义 Kronecker 符号可以简化计算过程，降低学生的理解难度，同时有助于学生更好地理解量子力学的基本概念和原理。通过将广义 Kronecker 符号与有限差分法相结合，学生能够更直观地看到量子力学中的数学运算过程，从而加深对量子力学知识的理解和掌握。通过本研究，期望为《量子力学》课程的教学改革提供新的思路，并为广义 Kronecker 符号在物理学教学中的应用提供实践经验。

一、基于广义 Kronecker 符号的薛定谔方程

（一）广义 Kronecker 符号概述

经典 Kronecker 符号通常表示为 δ_{ij}，用于描述两个整数 i 和 j 之间的关系。它的定义如下：

$$\delta_{i,j}=\begin{cases}1,\ 如果\,i=j\\0,\ 其他\end{cases}\qquad(1)$$

这种符号通常用来表示单位矩阵的元素，或者在数学、物理和工程中作为指示函数，指示两个指标是否相等。

广义 Kronecker 符号是对经典 Kronecker 符号的扩展，它不仅局限于离散系统中的单一整数对 i 和 j，还可以应用于更复杂的数学对象和结构中，如矩阵、张量、函数、甚至在连续空间中作为 Dirac delta 函数的一种形式。在高维空间中，广义 Kronecker 符号可以扩展为多个维度的形式。例如，考虑一个多维数组 $A_{i1,\ i2,\ \ldots in}$，广义 Kronecker 符号可以用于选择满足条件的多个维度上的元素：

$$\delta_{i_1j_1,i_2j_2,\ldots,i_nj_n}\ 或\ \delta^{i_1,i_2,\ldots,i_n}_{j_1,j_2,\ldots,j_n}=\prod_{k=1}^{n}\delta_{i_kj_k}\qquad(2)$$

（二）薛定谔方程中广义 Kronecker 符号的引入

有限差分法求解稳态薛定谔方程的基本过程是：先将所求解的空间划分为差分网格，便可用有限的网格点取代连续的空间域；将薛定谔方程中的微分项用差商替换，从而获得相应的差分方程，结合不同的网格点，便可组成有限个差分方程组；将差分方程组转换成矩阵形式，借助 Mathematica 或 Matlab 等计算软件求解每个网格点对应的本征解；最后将空间所有网格点的本征解组合，从而获得整个定域空间的数值解。

1. 一维系统广义 Kronecker 符号的引入

将一维空间分割为 N 个相等的间隔，并记点 $x_n=n\triangle x=nd(n=1,2,3\ldots N)$，则第 n 个格点的势能和波函数可分别记为 $\bar{V}_n=\bar{V}(x_n)=\bar{V}(n\triangle x)$ 和 $\psi_n=\psi(x_n)=\psi(n\triangle x)$。假设一维空间划分为 N 个网格点，波函数需满足边界条件 $\psi_0=\psi_{N+1}=0$。一维量子受限系统下的单电子定态薛定谔方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dx^2}+\bar{V}(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x).\qquad(3)$$

第 n 个网格点满足方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*d^2}\psi_{n-1}+\left(\frac{\hbar^2}{m^*d^2}+\bar{V}_n\right)\psi_n-\frac{\hbar^2}{2m^*d^2}\psi_{n+1}=E\psi_n.\qquad(4)$$

N 个网格点将有 N 条类似式（4）的方程，它们组成矩阵形式的薛定谔方程：

$$\begin{bmatrix}U_1 & -t_0 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ -t_0 & U_2 & -t_0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -t_0 & U_3 & \cdots & 0 & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & U_{N-1} & -t_0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -t_0 & U_N\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \vdots\\ \psi_{N-1}\\ \psi_N\end{bmatrix}=E\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \vdots\\ \psi_{N-1}\\ \psi_N\end{bmatrix}\rightarrow \mathbf{H}\Psi=E\Psi.\qquad(5)$$

其中，$t_0=\hbar^2/2m^*d^2$、$U_n=2t_0+\bar{V}n$。矩阵中的元素可表示为：

$$\left[\mathbf{H}\Psi\right]_{x=x_n}=\sum_{k=1}^{N}\left[U_n\delta_{n,k}-t_0\delta_{n,k+1}-t_0\delta_{n,k-1}\right]\psi_k.\qquad(6)$$

离散哈密顿量 H 的元素可表示为：

$$\left[\mathbf{H}\right]_{nk}=U_n\delta_{n,k}-t_0\delta_{n,k+1}-t_0\delta_{n,k-1}.\qquad(7)$$

式中 n、k 分别表示矩阵的行与列。将哈密顿量（7）和边界条件编程入计算软件中，再利用 Mathematica 软件中的“Eigensystem”函数或者 Matlab 软件中的“eigs”函数可数值解出薛定谔方程（5）的离散波函数和能级。

2. 二维定态薛定谔方程的离散形式

将二维空间分割为 N×N 个相等的网格，空间位矢 r 在直角坐标系下的两个分量分别用 x、y 表示。定义格点势函数 $\bar{V}mn=\bar{V}(xm,yn)=\bar{V}(m\triangle x,n\triangle y)$，格点波函数 $\psi_{nm}=\psi(x_my_n)=\psi(m\triangle x,n\triangle y)(m,\ n=1,2,3\ldots N)$。令步长值 $\triangle x=\triangle y=d$，二维空

间取 **N × N** 个网格点，波函数需满足边界条件：

$$\psi_{0,n}=\psi_{m,0}=\psi_{N+1,n}=\psi_{m,N+1}=0. \tag{8}$$

二维量子受限系统下的单电子定态薛定谔方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)+\bar{V}(x,y)\right]\Psi(x,y)=E\Psi(x,y). \tag{9}$$

第 **(m, n)** 个网格点满足方程：

$$U_{mn}\psi_{mn}-t_0\psi_{m,n+1}-t_0\psi_{m,n-1}-t_0\psi_{m-1,n}-t_0\psi_{m+1,n}=E\psi_{mn}. \tag{10}$$

式中 $\mathbf{U_{mn}=4t_0+\bar{V}_{mn}}$。类似地，**N×N** 个网格点可组成矩阵形式的薛定谔方程 **Hψ=Eψ**。广义二重 Kronecker 符号为：

$$\delta_{k,u}^{m,n}=\begin{cases}1, & m=k\text{且}n=u\\ 0, & \text{其他}\end{cases}\quad(k,u=1,2,3\cdots N). \tag{11}$$

矩阵 **Hψ** 中的元素可表示为：

$$[\mathbf{H\Psi}]_{x=x_m,y=y_n}=\sum_{k=1}^{N}\sum_{u=1}^{N}\left[U_{mn}\delta_{k,u}^{m,n}-t_0\delta_{k,u-1}^{m,n}-t_0\delta_{k,u+1}^{m,n}-t_0\delta_{k+1,u}^{m,n}-t_0\delta_{k-1,u}^{m,n}\right]\psi_{ku}. \tag{12}$$

因此，离散哈密顿量 H 的元素可表示为：

$$[\mathbf{H}]_{ij}=U_{mn}\delta_{i,j}-t_0\delta_{i,j-1}-t_0\delta_{i,j+1}-t_0\delta_{i,j-N}-t_0\delta_{i,j+N}. \tag{13}$$

式中 **i**、**j** 分别表示矩阵的行与列，并且 **i=(m−1)N+n**。同样，结合边界条件并利用计算软件可获得上述哈密顿量对应的本征解。

3. 三维定态薛定谔方程的离散形式

将三维空间分割为 **N×N×N** 个相等的立体网格，空间位矢 **r** 在直角坐标系下的三个分量分别用 **x**、**y**、**z** 表示。定义格点势函数 $\mathbf{\bar{V}_{mnh}=\bar{V}(x_m,y_n,z_h)=\bar{V}(m\triangle x,n\triangle y,h\triangle z)}$，格点波函数 $\mathbf{\psi mnh=\psi(x_m,y_n,z_h)=\psi(m\triangle x,n\triangle y,h\triangle z)(m,n,h=1,2,3\ldots N)}$。三维空间取 **N × N × N** 个网格点，并令步长值△ **x=** △ **y=** △ **z**，波函数需满足边界条件：

$$\psi_{0,n,h}=\psi_{m,0,h}=\psi_{m,n,0}=\psi_{N+1,n,h}=\psi_{m,N+1,h}=\psi_{m,n,N+1}=0. \tag{14}$$

三维量子受限系统下的单电子定态薛定谔方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*}+\bar{V}(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z). \tag{15}$$

第 (**m**, **n**, **h**) 个网格点满足方程：

$$U_{mnh}\psi_{mnh}-t_0\psi_{m,n,h+1}-t_0\psi_{m,n,h-1}-t_0\psi_{m-1,n,h}-t_0\psi_{m+1,n,h}-t_0\psi_{m,n+1,h}-t_0\psi_{m,n-1,h}=E\psi_{mnh}. \tag{16}$$

式中 $\mathbf{U_{mnh}=6t_0+\bar{V}_{mnh}}$。类似地，**N × N × N** 个网格点可组成矩阵形式的薛定谔方程 **Hψ=Eψ**。广义三重 Kronecker 符号为：

$$\delta_{k,u,g}^{m,n,h}=\begin{cases}1, & m=k,n=u\text{且}h=g\\ 0, & \text{其他}\end{cases}\quad(k,u,g=1,2,3\cdots N). \tag{17}$$

矩阵 Hψ 中的元素可表示为：

$$[\mathbf{H\Psi}]_{x=x_m,y=y_n,z=z_n}=\sum_{k=1}^{N}\sum_{u=1}^{N}\sum_{g=1}^{N}\begin{bmatrix}U_{mnh}\delta_{k,u,g}^{m,n,h}-t_0\delta_{k,u,g-1}^{m,n,h}-t_0\delta_{k,u,g+1}^{m,n,h}-t_0\delta_{k+1,u,g}^{m,n,h}\\ -t_0\delta_{k-1,u,g}^{m,n,h}-t_0\delta_{k,u-1,g}^{m,n,h}-t_0\delta_{k,u+1,g}^{m,n,h}\end{bmatrix}\cdot\psi_{kug}. \tag{18}$$

因此，离散哈密顿量 H 的元素可表示为：

$$[\mathbf{H}]_{ij}=U_{mnh}\delta_{i,j}-t_0\delta_{i,j-1}-t_0\delta_{i,j+1}-t_0\delta_{i,j-N}-t_0\delta_{i,j+N}-t_0\delta_{i,j+N^2}-t_0\delta_{i,j-N^2}. \tag{19}$$

式中 $\mathbf{i=(m-1)N^2+(n-1)N+h}$。结合边界条件并借助计算机可获得上述哈密顿量对应的本征解。

二、课堂教学实践分析

（一）实施过程

在《量子力学》课程的课堂上，我将广义 Kronecker 符号的应用引入薛定谔方程的数值解法中，具体步骤如下：1. 理论基础讲解：首先讲解薛定谔方程的基本理论，包括时间无关和时间依赖的形式，帮助学生理解该方程在量子力学中的基础地位。接着介绍有限差分法的基本概念，阐述如何通过网格离散化处理薛定谔方程。2. 广义 Kronecker 符号引入：在学生掌握基本的数值方法后，逐步引入广义 Kronecker 符号的定义和应用。通过有限差分法离散化薛定谔方程的例子，逐步引导学生理解广义 Kronecker 符号如何在数值求解中优化计算流程。3. 案例与计算练习：在讲解过程中，通过使用 MATLAB 和 Python 进行代码演示，并展示如何在离散型薛定谔方程中引入广义 Kronecker 符号。课后布置相应的计算题，让学生实际动手操作，使用该方法求解简单的薛定谔方程模型，帮助学生巩固知识。4. 课堂互动与讨论：通过提问和案例讨论激发学生对该方法应用的兴趣，并鼓励学生提出问题和意见。这样不仅能够帮助学生更好地理解新方法，还能够检验学生对概念的掌握程度。

（二）教学效果分析

1. 学生反馈

通过课堂观察和期中测验结果，绝大多数学生对广义 Kronecker 符号的应用表现出较高的接受度。在讲解和案例分析中，学生能够迅速理解该方法的基本原理，并能够在后续的数值计算中应用该方法。然而，一些学生在深入理解其数学推导和物理背景时存在困难。尤其是对没有深入学习过张量和矩阵代数的学生来说，理解该符号如何简化矩阵运算和数值解法中的实际应用可能需要一定的数学基础。而在教学过程中，学生对其数学推导和物理背景的理解也可能面临一定的挑战。

为了帮助学生逐步克服对广义 Kronecker 符号的理解困难，我设计了分层次的教学方案。首先，在讲解该符号的基础定义时，尽量将其与学生已经掌握的线性代数知识相结合，采用直观的矩阵例子来展示符号的使用。同时，我将符号的数学推导和实际应用分开讲解，逐步引导学生深入理解。在教学过程中，采用多样化的教学手段，如图形化工具和可视化展示，帮助学生更加形象地理解符号在数值解法中的作用。在课堂上，通过小组讨论和问题解答的方式，鼓励学生互相分享理解，减轻他们在理论理解上的难度。在教学进程中，教师要注意对学生的个别差异进行关注，特别是对于基础薄弱的学生，提供额外的辅导和材料，确保他们能够跟上课程的进度。在期中和期末考试中，涉及广义 Kronecker 符号的相关题目成绩表现出色，大多数学生能够准确完成与该方法相关的计算题和理论分析题。

2. 成效评估

传统的数值方法，如经典的有限差分法，在处理大规模矩阵时往往会面临计算量大、精度低的问题。引入广义 Kronecker 符号后，计算效率得到了显著提升，尤其是在矩阵运算和网格离散化的过程中，学生能够通过该符号减少冗余计算，提高求解速度。通过反馈和观察，发现广义 Kronecker 符号不仅有助于解决传统数值方法中的计算难题，还帮助学生在量子力学的学习中，建立了更加直观和高效的数值思维方式。通过引导学生逐步掌握广义 Kronecker 符号的基本概念和在数值解法中的应用，学生对薛定谔方程的求解过程有了更深入的理解。尽管部分学生在初次接触时存在一定的理解难度，但通过结合案例分析和计算练习，学生能够在实际操作中应用该符号，有效提高了他们的计算能力和对数值解法的掌握程度。整体上，学生对新方法的接受度较高，并且在作业和考试中的表现也得到了体现。最终大多数学生能够掌握并灵活运用这一方法。

三、结论

本研究通过在薛定谔方程的数值解法中引入广义 Kronecker 符号，成功地简化了复杂的数学计算过程，并有效降低了学生的理解难度。该方法不仅提升了薛定谔方程数值解法的教学效果，还帮助学生更好地理解和掌握量子力学中的关键概念。通过课堂实践，学生在学习过程中表现出较高的接受度，并能够灵活运用该方法解决实际问题。未来，广义 Kronecker 符号的应用可拓展到其他量子力学问题中，进一步优化数值解法，并为量子力学教学提供更为高效和直观的工具。

参考文献：

[1] 乔鹏，方基宇，牛中明. 有限差分法求解薛定谔方程 [J]. 贵州师范学院学报，2019,35(12): 28-32.

项目来源：国家自然科学基金青年科学基金 (62405054)；广东省教育厅高等院校青年创新人才项目 (2024KQNCX150)

作者简介：李克银（1992.02），男 汉族 广东汕头人，博士，讲师。