

## $E_{gs} - b$ 的关系

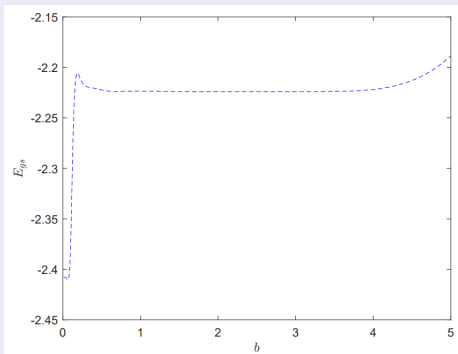


图 1

- 选择从左边开始寻找极值点做变分
- 目标：直到最小特征值  $E_{gs}$  收敛

## 变分

```
476     b=0.1 !初值
477     do while(abs(egs2-egs1)>tol)
```

图 2: 用 CAUCHY 收敛条件对  $b$  进行变分, 并给定起始点 (初值)

```
519         call eigenvalue(n_basis+1,H,wr,wi,vr)
520
521
522         egs1=egs2           !CAUCHY收敛的循环体
523         egs2=minval(wr)
524
```

图 3: 前后两次循环的最小特征值

```
562         !deallocate所有allocate的内存
563
564         deallocate(psi,d2psi,vpot,H,rr,rrw)
565         deallocate(wr,wi,z,vr,PHI)
566
567         b=b+0.1           !CAUCHY收敛的循环体
568     end do
```

图 4: 结尾增加步长, 如果是从右往左寻找那就是减少步长

## 结果

```
最小特征值: -2.2239926818144760  
最小特征值所在位置: 9  
运行时间: 0.41835199999999995
```

图 5: 对  $b$  变分的结果

```
≡ fort.27  
1 | 2.0000000000000000 | -2.2239926818144760  
2 |
```

图 6: 对  $b$  变分的结果,  $b$  的值约为 2.0

## 结果

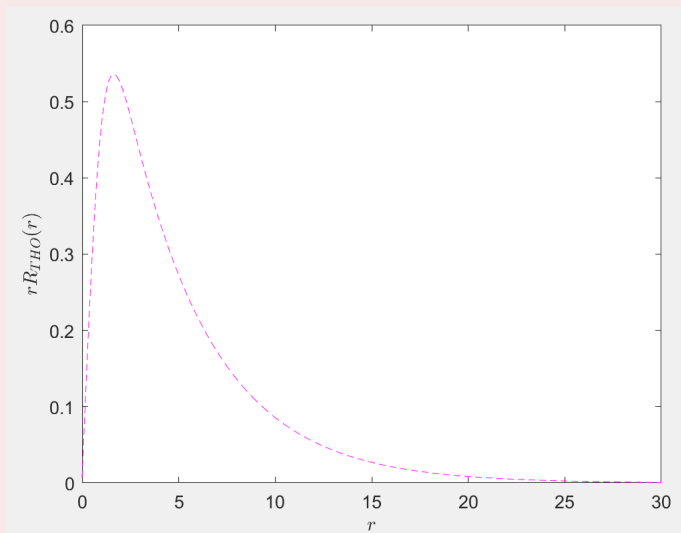


图 7: 用 THOBASIS 计算的 np 基态波函数  $rR_{THO}(r)$

## 结果

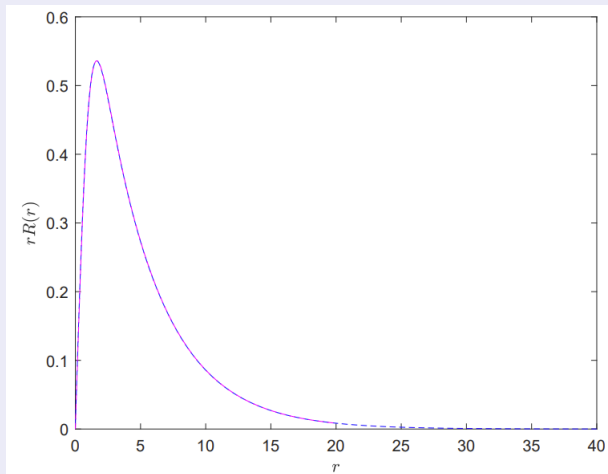


图 8:  $rR_{THO}(r)$  和正确的结果  $rR(r)$  做比较, 其中蓝色线是 THOBASIS 计算的结果

$$\int_0^{\infty} r^2 |R_{n,\ell}^{\text{THO}}(r)|^2 dr = 1. \quad (6)$$

图 9: reference 里 THOBASIS 的归一化条件

实际上：(伪) 的归一化条件

$$\begin{aligned} & \int r^2 R_{nl}^{\text{HO}}(r)^2 dr = 1 \\ \rightarrow & \int s^2 R_{nl}^{\text{HO}}(s)^2 ds = 1 \\ \rightarrow & \int s^2 R_{nl}^{\text{HO}}(s)^2 s'(r) dr = 1 \\ \rightarrow & \int s^2 R_{nl}^{\text{THO}}(r)^2 dr = 1 \end{aligned}$$

其中

$$R_{nl}^{\text{THO}}(r) = \sqrt{\frac{ds}{dr}} R_{nl}^{\text{HO}}[s(r)]$$