计算物理第六次作业

李柏轩 20300200004

November 9, 2022

1 题目 1：One-dimensional Kronig-Penney problem

1.1 题目描述

Single particle in a periodic potential $V(x) = V(x+a)$(as shown in Fig.1). Using FFT, find the lowest three eigenvalues of the eigenstates that satisfy $\psi_i(x) = \psi_i(x+a)$.

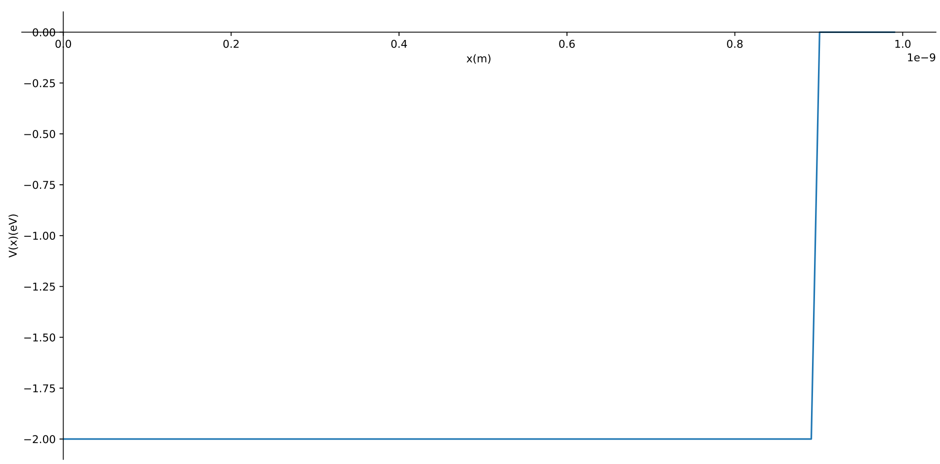

Figure 1: Potential

1.2 程序描述

本程序利用 FFT 求解一维 Kronig-Penney 问题。以 Fourier 基 $|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{iq\frac{2\pi}{a}x}$ 为基矢对势能函数与态矢量进行展开：$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q C_q e^{iq\frac{2\pi}{a}x}, V(x) = \frac{1}{N}\sum_{q'} V_{q'} e^{iq'\frac{2\pi}{a}x}; q, q' = -N, -N+1, \cdots, 0, \cdots, N-1, N$（根据 Numpy.fft 的 default convention），求出哈密顿量在 Fourier 基下的矩阵表示：

$$\begin{aligned}
\langle p|\hat{T}|q\rangle &= \frac{1}{N}\frac{2\hbar^2 q^2\pi^2}{ma^2}\sum_x e^{i(q-p)\frac{2\pi}{a}x} = \frac{2\hbar^2 q^2\pi^2}{ma^2}\delta_{p,q} \\
\langle p|\hat{V}|q\rangle &= \frac{1}{N^2}\sum_{q'} V_{q'} \sum_x e^{i(q+q'-p)\frac{2\pi}{a}x} = \frac{1}{N}V_{p-q}
\end{aligned} \tag{1}$$

，之后求解本征值问题得到本征能量与各 Fourier 分量的幅值。

Kronig-Penney 问题可以严格求解。在 $[0,1]$ 的一个周期内，设势能形式为

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & 0<x\le b\\ 0, & b<x\le a\end{cases} \tag{2}$$

定态 Schrodinger 方程和边界条件为

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi-V_0\psi=E\psi, & 0<x\le b\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi=E\psi, & b<x\le a\\ \psi(0+0)=\psi(a-0)\\ \psi(b-0)=\psi(b+0)\\ \left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x=0+0}=\left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x=a-0}\\ \left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x=b-0}=\left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x=b+0}\end{cases} \tag{3}$$

由 $E>V_{min}=-V_0$，令 $\kappa=\dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar},k=\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，于是有

$$\begin{cases}\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\kappa^2\psi=0, & 0<x\le b\\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}=k^2\psi, & b<x\le a\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\psi=A\sin\kappa x+B\cos\kappa x, & 0<x\le b\\ \psi=Ce^{kx}+De^{-kx}, & b<x\le a\end{cases} \tag{4}$$

其一阶导为

$$\begin{cases}\dfrac{d\psi}{dx}=\kappa\left(A\cos\kappa x-B\sin\kappa x\right), & 0<x\le b\\ \dfrac{d\psi}{dx}=k\left(Ce^{kx}-De^{-kx}\right), & b<x\le a\end{cases} \tag{5}$$

代入边界条件得：

$$\begin{cases} & B & -Ce^{ka} & -De^{-ka} & =0\\ \kappa A & & -Cke^{ka}+ & Dke^{-ka} & =0\\ A\sin\kappa b+ & B\cos\kappa b & -Ce^{kb} & -De^{-kb} & =0\\ A\kappa\cos\kappa b & -B\kappa\sin\kappa b & -Cke^{kb}+ & Dke^{-kb} & =0\end{cases} \tag{6}$$

方程转化为求解行列式：

$$\begin{vmatrix}0 & 1 & -e^{ka} & -e^{-ka}\\ \kappa & 0 & -ke^{ka} & ke^{-ka}\\ \sin\kappa b & \cos\kappa b & -e^{kb} & -e^{-kb}\\ \kappa\cos\kappa b & -\kappa\sin\kappa b & -ke^{kb} & ke^{-kb}\end{vmatrix}=0 \tag{7}$$

得到 E_n 为相应的束缚态能级。

本程序源文件为 Kronig_Penney.py，运行依赖 Python 第三方库 Numpy、Scipy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录，使用命令 python -u Kronig_Penney.py 运行本程序。运行后在控制台输出最低的三个本征态能量，并输出势能函数 $V(x)$ 图像及其频谱图像分别如 Fig.1和 Fig.3所示。

1.3 伪代码

求解一维 Kronig-Penney 问题的伪代码如 Alg.1所示。

Algorithm 1 1-D Kronig-Penney problem

Input: A given potential array V and sampling number $N = 2N_1 + 1$

Output: The lowest three eigenstates E satisfying the periodic condition.

$V_{q'} \leftarrow \sum_x V(x) e^{-iq' \frac{2\pi}{a} x}$
for $p \leftarrow -N_1 : N_1$ **do**
  for $q \leftarrow -N_1 : N_1$ **do**
    $H(p,q) \leftarrow \frac{2\hbar^2 q^2 \pi^2}{ma^2} \delta_{p,q} + \frac{1}{N} V_{p-q}$
  end for
end for
$E \leftarrow$ eigvalsh(H)//calling the eigval() function of scipy

1.4 输入输出示例

设置采样点个数为 101，程序输出 $V(x)$ 频谱如 Fig.3所示。利用 Mathematica 求解 Eq.7的行列式得到最小三个本征值（如 Fig.2所示），并在控制台输出最小的三个本征值。理论值、输出值与相对误差如 Table.1所示。 注意到结果有较大误差。改变采样点个数观察本征值的收敛情况，得到 Fig.4所示结果。三个本征值分别收敛到-1.855、-0.4818、-0.1155，故知采用该方法时选取的基函数的不完备性对结果有较大影响。

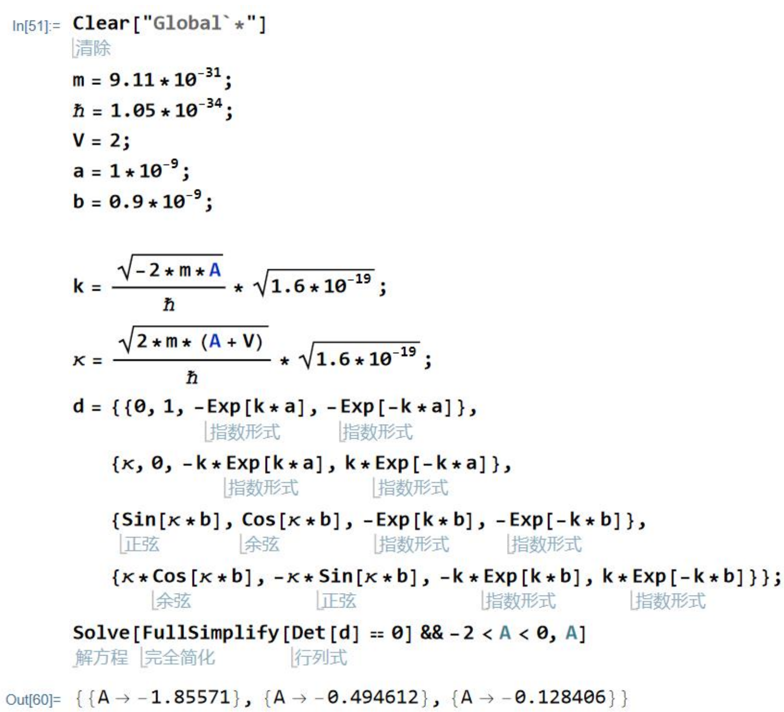

Figure 2: 求解行列式

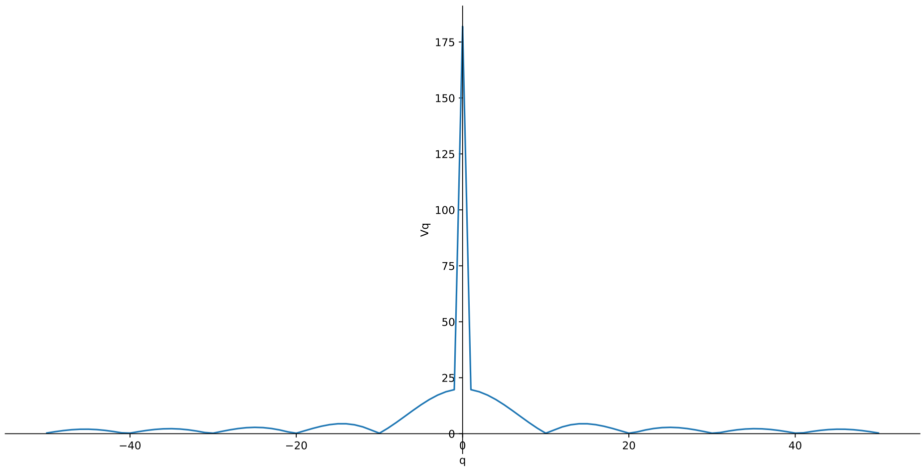

Figure 3: $V(x)$ 的频谱图像

Table 1: 理论值、输出值以及相对误差

理论值 (eV)	-1.85571	-0.494612	-0.128406
输出值 (eV)	-1.85648932	-0.48224878	-0.11901036
相对误差 (%)	0.04	2.5	7.3

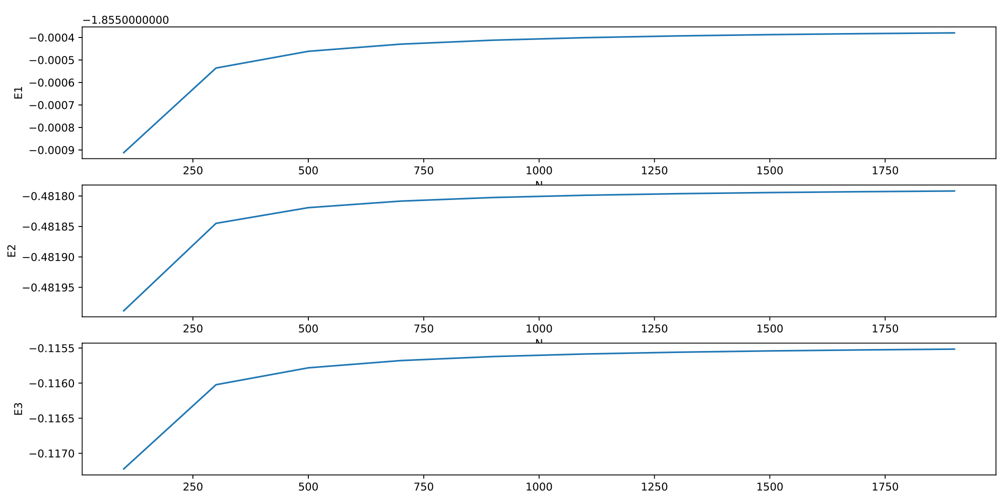

Figure 4: 改变采样点个数本征值收敛情况

2 题目 2：数值积分

2.1 题目描述

Detecting periodicity: Download the file called sunspots.txt, which contains the observed number of sunspots on the Sun for each month since January 1749.

Write a program to calculate the Fourier transform of the sunspot data and then make a graph of the magnitude squared $|C_k|^2$ of the Fourier coefficients as a function of k–also called the power spectrum of the sunspot signal. You should see that there is a noticeable peak in the power spectrum at a nonzero value of k. Find the approximate value of k to which the peak corresponds. What is the period of the sine wave with this value of k?

2.2 程序描述

本程序对某时变数据使用 FFT 进行处理，从频谱中读取数据变化的角频率从而获取数据周期。

本程序源文件为 Sunspot.py，运行依赖 Python 第三方库 Numpy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录，使用命令 python -u Sunspot.py 运行本程序。运行后输出原始数据与频谱图像如 Fig.5所示，并在控制台输出频谱上三个峰值的横坐标 k 值。

2.3 伪代码

获取数据周期的伪代码如 Alg.2所示。

Algorithm 2 Finding the period of data

Input: The initial data array F

Output: The spectrum array of F and the position of its three highest peaks.

1: $K \leftarrow (-\frac{N-1}{2} : \frac{N-1}{2}) \times \frac{2\pi}{L}$ //N is the sampling number, L is the range of observing.

2: $F_k^2 \leftarrow \sum_x F(t) e^{-ik\frac{2\pi}{a}t}$

3: print($K[F_k^2$.argsort()$[-3:]]$)//calling the function argsort() which return the sortied indices of a given array; [-3:] means the indices of the smallest three elements

2.4 输入输出示例

控制台输出 Fig.5下图三个峰值的位置为：$\pm 0.04799378, 0$，于是数据周期为 $T = \frac{2\pi}{k} = 130.92$(月)，即 10.91 年，与常识（太阳活动以 11 年为周期）相符。

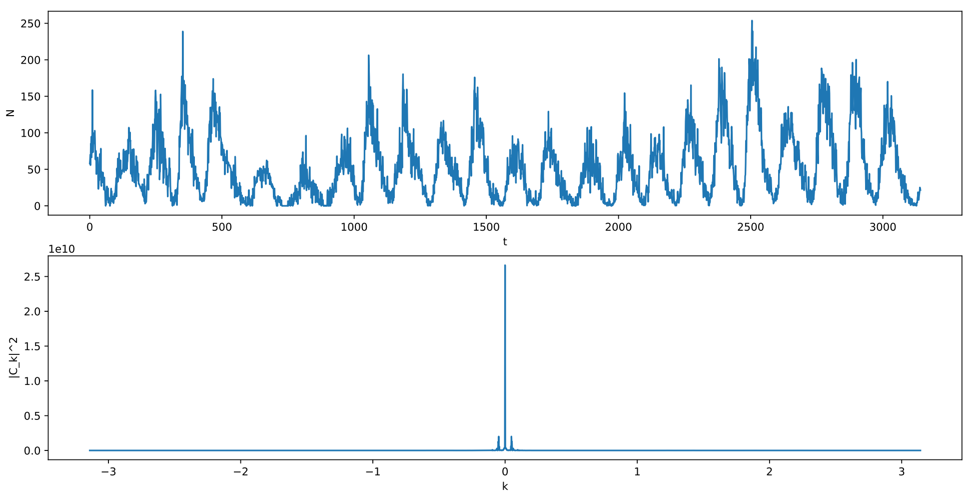

Figure 5: 原始数据与频谱图像