

1D Infinite Well

20171057

Dongkyu Lee

Introduction and Approach

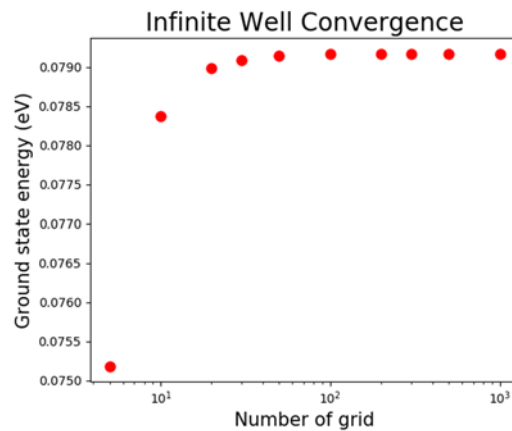
1 차원 infinite potential well 문제를 풀어 보았다. Well 의 폭은 5nm, silicon light mass($m^* = 0.19m_0$) particle 를 가정하였다.

언어는 python 을 사용했으며 eigen solver 로 numpy package 안의 `numpy.linalg.eig()` 함수를 사용하였다. 이번 문제에서 사용할 오퍼레이터는 -2 의 대각성분과, 1 의 대각 양 옆 성분으로 이뤄져 있기 때문에 `numpy.eye()` 함수를 사용하여

$$O = -2 * \text{numpy.eye}(N-2) + \text{numpy.eye}(N-2, k=1) + \text{numpy.eye}(N-2, k=-1)$$

로 구성하였다 (N expansion 을 위한 for 문과 if 문의 반복은 계산 cost 의 많은 소모를 야기시키기 때문에).

Result and Conclusion



N	5	50	500	1000
E_{ground} [eV]	0.07518354	0.07914335	0.07917021	0.0791704

1 Kelvin 에 대한 thermal fluctuation 의 값이 8.6×10^{-5} eV 이므로 허용할 수 있는 energy 의 error 를 10^{-4} eV 로 봤을 때, N=50 에서 충분히 수렴이 이루어 졌음을 알 수 있었다.