

# MOFIT

## SE 1D

stany zdekalizowane  $E >$   
stany dyktu  $E <$  - prog continuum



## METODA RÓZNIC SKOŃCZONYCH

liczymy na GaAs, j. atomowe  $\rightarrow$  wyniki nm, eV

- definicja siatki oczek
- f. fal zmierz na pierwszym oczku
- w drugim pkt coholek przyjmuje np 1

Energia: warunki brzegowe?

tylko 1D

## METODA SZERZĄCÓW

# kanciasta f. fal

## STUDNIA NIESKOŃCZONA

legalne f. falowe, w. brzegowe.

- szukamy miejsc zerowych

w imię większej dokładności  $\rightarrow$  kryteria Taylor, ratowanie oszczędnej pochodnej

$$y''(x) = s(x) - g(x)y(x) \quad \text{pochodna prawej strony i w 4 pochodną}$$

$\nearrow$  SE. # post. jednorodnie  $\rightarrow s=0$  zamiast  $y$ , f. fal  $\psi$

$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

## STUDNIA SKOŃCZONA

# stany związane + niezwiązane

metoda prób i błędów bo niewiadomo gdzie przewoży pkt postawić

# operator parzystości dla symetrycznej studni

$$P\psi(x) = \psi(-x) \quad \text{def}$$

? nieparzyste w pkt 1 przyjmuje coholek?  
 $\psi(0) = 0$ ,  $\psi(\Delta x) = a$

$$P\psi(x) = \lambda \psi(x) \quad \text{v.w.}$$

$$P^2\psi(x) = \psi(x) = \lambda P\psi(x) = \lambda^2 \psi(x) = \psi(x)$$

$\downarrow$   
 $\lambda^2 = 1$

parzyste  $\psi(0) = b$ ,  $\psi(\Delta x) = b$   
zerowa pochodna w  $x=0$

JAK SIĘ NIE TRFI W ENERGIĘ TO WYBUCHA

## METODA NEWTONA - RAPHSONA

jeżeli  $\psi$  w liczniku to mamy zbliżenie

jak się ze drugo iteruje to przybliżenie się sypie

dobrze startować od bisekcji i z miejsca zerowego odpalać Newtona

współmierność  $\Delta x \propto L$

dla wielu wymiarów

## METODA ITERACJI W CZASIE UROJOUNM

SE zależne od czasu  $|\psi_n(x,t)|^2 \rightarrow \exp$  redukuje się do 1  $\rightarrow \neq 0 \rightarrow$  stan stacjonarny

$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$  ortogonalne

cośkolwiek jako pocz, zamknij symulować, porzekaj, dostaniesz coś proporcjonalnego

$\frac{d\tau}{dt} = \alpha$  „parametr Kowalskiego  $\propto \chi D$ ” nie wiadomo czym jest  $d\tau$

jak  $\psi(\tau)$  unormowane to  $\psi(\tau+d\tau)$  nie i trzeba unormować

$\psi(\tau+d\tau) = \psi(\tau) - \alpha H \psi(\tau)$  ← wycinanie przyrostu od poprzedniego stanu?

$\alpha$  ma wartość krytyczną więc przeskalowanie mek

# nowa  $\psi = \text{stare } \psi - \alpha H \psi$  nie ma żadnej macierzy