

Metoda czasu urojonego

15 października 2023

1 stan podstawowy

1.1

H z poprzedniego laboratorium. Przyjmujemy $N = 300$, $W = 0$ meV. (Uwaga, do testowania programu można przyjąć np. $N = 100$).

Metoda iteracji w czasie urojonym dla stanu podstawowego sprowadza się do wielokrotnego zastosowania przepisu

$$\Psi := (1 - \alpha H)\Psi, \quad (1)$$

gdzie α jest parametrem metody.

Wynik działania Hamiltonianu na siatce: $H\Psi(i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(i+1) + \Psi(i-1) - 2\Psi(i)}{\Delta x^2} + V_i\Psi(i)$.

Podstawienie (1) implementujemy używając dwóch tablic: odpowiadającym nowej Ψ' i starej Ψ funkcji falowej. Dla siatki punktów numerowanych od 0 do N , opuszczamy węzły brzegowe dla których trzymamy $\Psi(0) = \Psi(N) = 0$. Ustawiamy startowe wartości funkcji falowej Ψ w każdym oczku siatki, używając wartości losowych z przedziału $[-1, 1]$. Podstawienie (1) wprowadzamy w następujący sposób:

- do $i=1, N-1$
- $\Psi'(i) = \Psi(i) - \alpha H\Psi(i)$
- enddo
- do $i=1, N-1$
- $\Psi(i) = \Psi'(i)$
- enddo

Po każdym podstawieniu (1) należy funkcję unormować: liczymy całkę z $|\Psi|^2$, a potem dzielimy funkcję falową przez pierwiastek z tej całki.

$$I = \sum_{i=0}^N |\Psi(i)|^2 \Delta x, \quad (2)$$

$$\forall_i \Psi(i) := \frac{\Psi(i)}{\sqrt{I}} \quad (3)$$

Dla unormowanej funkcji falowej wartość oczekiwana energii liczona jest jako

$$\langle E \rangle = \sum_{i=0}^N \Psi(i) H\Psi(i) \Delta x, \quad (4)$$

Po wyliczeniu energii kończymy iterację i przechodzimy do kolejnej, zaczynając od ponownego podstawienia wg wzoru (1).

W czasie iteracji obserwujemy $\langle E \rangle$. Gdy przestanie się zmieniać (np. $|\langle E \rangle_{old} - \langle E \rangle_{new}|$ jest mniejsze niż 10^{-6} meV), można zakończyć rachunek.

1.2

Wg analizy von Neumanna (wynik) optymalna wartość parametru α dla stałego potencjału wynosi $\alpha = \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2}$. Jest to również wartość krytyczna dla zbieżności metody, powyżej której rachunek jest rozbieżny. Dla bezpieczeństwa proszę przyjąć $\alpha = 0.95 \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2}$. Zbadać zbieżność wartości oczekiwanej energii w zależności od α (sprawdzić kilka wartości α w pobliżu wartości krytycznej) **(40 pkt)**.

1.3 Pierwszy stan wzbudzony

Po wyliczeniu stanu podstawowego (E_1, Ψ_1) możemy spróbować wyznaczyć pierwszy stan wzbudzony. Iteracja przebiega w następujący sposób:

- (i) liczymy $\Psi_2 := (1 - \alpha H)\Psi_1$ (implementacja jak wyżej)
- (ii) ortonormalizujemy wynik do Ψ_1 :
- (iia) liczymy rzut iterowanej funkcji na funkcję stanu podstawowego $c_1 = \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \sum_{i=0}^N \Psi_1(i) \Psi_2(i) \Delta x$
- (iib) usuwamy z iterowanej funkcji falowej przyczynek od stanu podstawowego $\forall_i \Psi_2(i) := \Psi_2(i) - c_1 \Psi_1(i)$ (po tym podstawieniu iterowana Ψ_2 jest ortogonalna do Ψ_1)
- (iii) normujemy Ψ_2 i wracamy do (i), chyba że osiągnęliśmy zbieżność.

1.4

Wyznaczyć stan 2. Udokumentować zbieżność procedury iteracyjnej, oraz funkcję falową. **(30 pkt)**

1.5

Powtórzyć obliczenia dla stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego dla $W = 500$ meV **(30 pkt)**. Porównać wynik z uzyskanym metodą strzałów.

Uwagi:

- Udokumentowanie zbieżności energii na wykresie w funkcji liczby iteracji warto wykonać w skali logarytmicznej.
- Dla $W \neq 0$, można dobrać nieco niższą wartość parametru tolerancji wymaganej do przerywania iteracji.
- Proszę nie zapomnieć o unormowaniu funkcji falowej w każdej iteracji.