

# CompPhys Assignment 06

李尚坤 物理学系 20307130215

## 1 Kronig-Penney Problem

### 1.1 题目描述

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ . Periodic potential  $V(x) = V(x + a)$ .

Using FFT, find the lowest three eigenvalues of the eigenstates that satisfy  $\psi_i = \psi_i(x + a)$ .

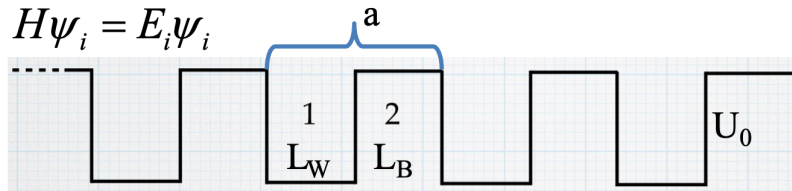


图 1: Potential  $V(x)$

$$U_0 = 2eV, L_w = 0.9nm, L_B = 0.1nm, a = 1nm$$

### 1.2 解决方案描述

由于本题中波函数是周期性的  $\psi(x) = \psi(x + a)$ ，因此我们可以将其展开为傅立叶级数的形式：

$$\psi(x) = \sum_{q=-N}^N C_q e^{iq \frac{2\pi}{a} x} \quad (1.1)$$

同时，由于本题中势能函数也是周期性的  $V(x) = V(x + a)$ ，也将其展开为傅立叶级数的形式：

$$V(x) = \sum_{q'=-N}^N V_{q'} e^{iq' \frac{2\pi}{a} x} \quad (1.2)$$

接下来我们计算哈密顿算符对应的矩阵元：

$$\begin{aligned}
H_{pq} &= \left\langle e^{ip\frac{2\pi}{a}x} \left| \hat{H} \right| e^{iq\frac{2\pi}{a}x} \right\rangle \\
&= \left\langle e^{ip\frac{2\pi}{a}x} \left| \hat{T} \right| e^{iq\frac{2\pi}{a}x} \right\rangle + \left\langle e^{ip\frac{2\pi}{a}x} \left| V(x) \right| e^{iq\frac{2\pi}{a}x} \right\rangle \\
&= \left\langle e^{ip\frac{2\pi}{a}x} \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right| e^{iq\frac{2\pi}{a}x} \right\rangle + \left\langle e^{ip\frac{2\pi}{a}x} \left| \sum_{q'=-N}^N V_{q'} e^{iq'\frac{2\pi}{a}x} \right| e^{iq\frac{2\pi}{a}x} \right\rangle \\
&= \frac{2\hbar^2 q^2 \pi^2}{ma^2} \int_0^a e^{i(q-p)\frac{2\pi}{a}x} dx + \sum_{q'=-N}^N V_{q'} \int_0^a e^{i(q'+q-p)\frac{2\pi}{a}x} dx \\
&= \frac{2\hbar^2 q^2 \pi^2}{ma^2} \delta_{pq} + aV_{p-q}
\end{aligned} \tag{1.4}$$

其中应当注意的是上式第 2 项，由于经过傅立叶变换后势函数的系数  $V_{q'}$  的下标取值范围为  $-N, -(N-1), \dots, N-1, N$ ，但上式  $p-q$  的值却可能超出这个范围，由积分计算式可知只需要将超出下标范围的值取为 0 即可。在数值计算中，为方便运算，取  $\frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2} = 1$ 。

### 1.3 伪代码

---

#### Algorithm 1: Kronig-Penney Problem

---

**Input:** The number of the sample points  $N$

**Output:** The three lowest eigenvalues of this problem

```

1 V  $\leftarrow$   $N$  equal space points of potential  $V(x), x \in (0, a)$ 
2 Vfft  $\leftarrow$  FFT(V)
3 for  $p \leftarrow 0$  to  $N-1$  do
4   for  $q \leftarrow 0$  to  $N-1$  do
5     if  $0 \leq p-q \leq N-1$  then
6        $H[p][q] \leftarrow \mathbf{V}_{\text{fft}}[p-q]$ 
7     end
8     if  $p = q$  then
9        $H[p][q] \leftarrow \mathbf{V}_{\text{fft}}[p-q] + q^2$ 
10    end
11  end
12 end
13 eigvals  $\leftarrow$  EIGENVALUES(H)
14 SORT(eigvals)
15 return eigvals[1:7] // The energy level is degenerate

```

---

### 1.4 输入输出示例

本题中我们要求输出最低的 3 个能量本征值，由于能级简并度为 2，因此我们需要输出最低的 6 个本征值，如下表所示：

Input	Outputs					
N=2000	1.002	1.002	4.002	4.002	9.002	9.002

表 1: 最低的 3 个能量本征值

我们进一步作出前几个能级的能量值图：

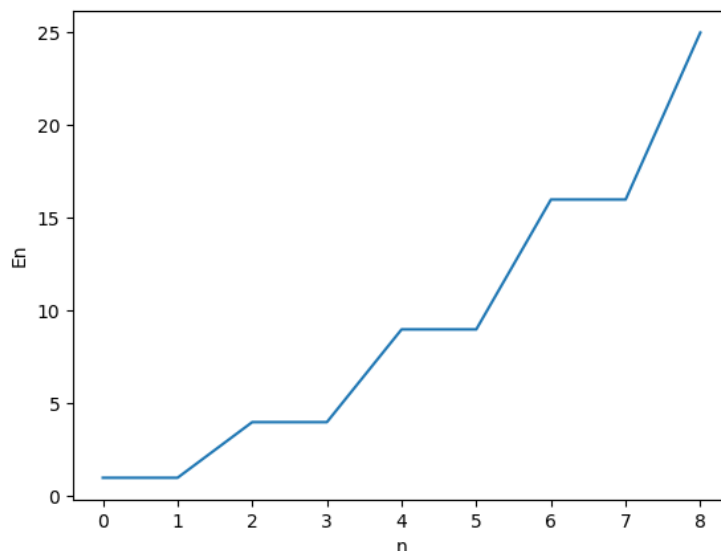


图 2: 能级图

从图中和输出的结果我们可以发现，Kronig-Penney Problem 中会存在能隙，在本题中前三个平台的能量比值为 1 : 4 : 9. 程序在终端运行时的输出结果如下：

```

~/Documents/180/code/python/compr/h3/Assignment_06/Kronig_Penney.py
The three lowest eigenvalues are:
[1.002 1.002 4.002 4.002 9.002 9.002]
~/Documents/180/code/python/compr/h3/Assignment_06/Kronig_Penney.py

```

图 3: 终端输出结果图

## 1.5 用户手册

1. 本程序的源程序为 Kronig\_Penney.py
2. 在执行源程序之前，应当先安装 numpy, matplotlib, scipy 库
3. 本程序分别利用快速傅立叶变换求解周期性波函数的能量本征值
4. 运行程序后，在终端将输出最低的 3 个能量本征值，并且将绘制出前几个本征值的能级图

## 2 Detecting Periodicity

### 2.1 题目描述

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 解决方案描述

本题只需要对文件中的数据进行快速傅立叶变换，然后绘制出  $k \sim |c_k|^2$  的关系图，最后再找到峰值对应的  $k$  即可。这个峰值  $k$  对应的周期为  $T = \frac{N}{k}$ ，其中  $N$  为总月数，在题目中  $N = 3143$ 。

### 2.3 伪代码

---

**Algorithm 2:** Detecting Periodicity

---

**Input:** sunspots.txt

**Output:** The picture of  $k \sim |c_k|^2$

- 1  $\mathbf{Y} \leftarrow$  datas in sunspots.txt
  - 2  $\mathbf{Y}_{\text{fft}} \leftarrow \text{FFT}(\mathbf{Y})$
  - 3 PLOT the graph of  $k$  and  $|\mathbf{Y}_{\text{fft}}[k]|^2$
- 

### 2.4 输入/输出示例

因为快速傅立叶变换的结果关于频率中点对称，因为此处只绘制出其中一半的结果。输出结果如下左图所示：

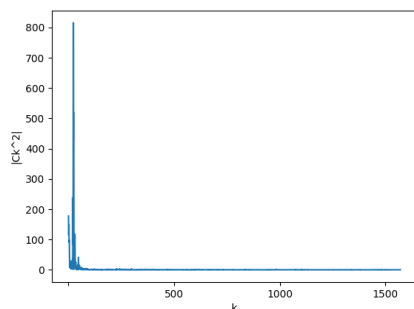


图 4:  $k \sim |c_k|^2$  关系图

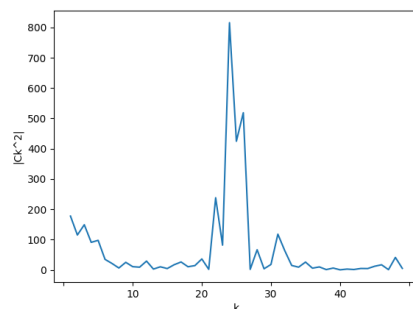


图 5:  $k \sim |c_k|^2$  关系图 (局部)

若观察关系图峰值附近的局部特征，可以得到上面右边的图。从这张图我们可以看出，这个峰值对应有  $k = 24$ 。

对应的周期为  $T = \frac{N}{k} = \frac{3143}{24} \approx 131$  月  $\approx 11$  年。也就是说太阳黑子的周期约为 11 年，与真实情况相吻合。

## 2.5 用户手册

1. 本程序的源程序为 Sunspots.py
2. 在执行源程序之前，应当先安装 numpy, matplotlib, scipy 库
3. 本程序分别利用快速傅立叶变换分析太阳黑子的观测数据
4. 运行程序后，将先绘制出总体的  $k \sim |c_k|^2$  的关系图，关闭这一窗口后，将绘制出峰值附近的图像特征