

第六次作业

尹朝阳 物理学系

1 题目 1

1.1 题目描述

One-dimensional Kronig-Penney problem. Periodic potential $V(x) = V(x + a)$. Using FFT, find the lowest three eigenvalues of the eigenstates that satisfy $\phi_i(x) = \phi_i(x + a)$.

1.2 程序描述

本题目要求求解一维周期性有限深方势阱的 Kronig-Penney 问题，要求求出最低的三个能量本征值。

由于势函数延伸到无穷远，所以直接求解薛定谔方程较为困难。又因为势函数为周期函数，所以可以用 FFT 变换到频域求解，此时只需要考虑一个周期内的函数形式，然后在 FFT 时周期延拓到全空间。

本题的具体求解分为三个部分，分别为对势函数进行 Fourier 变换，求解哈密顿矩阵 H 的矩阵元，以及计算 H 矩阵的本征值。

首先对势场

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l_w \\ U_0, & l_w < x < a \end{cases}$$

进行 FFT，得到频域中的势函数 $V'_{q'}$ ：

$$V(x) = \sum_{q'=-N}^N V'_{q'} e^{iq' \frac{2\pi}{a} x} \quad (1)$$

然后计算哈密顿矩阵 H 。

因为 $\hat{T} e^{iq \frac{2\pi}{a} x} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{iq \frac{2\pi}{a} x} = \frac{2\hbar^2 q^2 \pi^2}{ma^2} e^{iq \frac{2\pi}{a} x}$ ，所以

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

取 $0 \sim 2N$ 一共 $2N + 1$ 个点，则在 FFT 之后 Nyquit frequency = N ，在采样频率足够高（Nyquit frequency 大于势函数最大频率）的情况下，只有 $0 \sim N$ 部分为真实频率，

而 $N+1 \sim 2N$ 部分与前半部分镜像对称, 由于 $V_{q'}$ 的周期性, $V_{q'=x} = V_{q'=x+2N}$, 则可以将后半部分平移到 $-N \sim 0$ 处。平移操作正好可以与 python 的负索引对应, 则 (2) 式变为

$$H_{pq} = \frac{2\hbar^2 q^2 \pi^2}{ma} \delta_{p,q} + a V'_{p-q} \quad (3)$$

最后对 H 矩阵求解其本征值, 对本征值列表进行排序后, 取最小的前三项即可。

本题的源程序为 1D-Kronig-Penney_FFT/KronigPenney.py, 导入的第三方库有 numpy 以及 numpy.fft.fft。

1.3 伪代码

Algorithm 1 Richardson extrapolation

Output : the lowest three eigenvalues

```

1: function INTEGRAL( $i, j, V'$ )
2:   if  $i = j$  then
3:     return  $\frac{2\hbar^2 \pi^2}{m \cdot a} (j - N)^2 + a * V'_{i-j}$ 
4:   else
5:     return  $a * V'_{i-j}$ 
6:   end if
7: end function
8:  $x \leftarrow [0 : a : 2N]$ 
9: for  $i \leftarrow 0$  to  $2N$  do
10:   $V_i \leftarrow V(i)$ 
11: end for
12:  $V' \leftarrow FFT(V)/(2N + 1)$ 
13: for  $i \leftarrow 0$  to  $2N$  do
14:   for  $j \leftarrow 0$  to  $2N$  do
15:     $H_{ij} \leftarrow INTEGRAL(i, j, V')$ 
16:   end for
17: end for
18:  $eigenvalues \leftarrow$  the eigenvalues of the  $H$  matrix
19:  $SORT(eigenvalues)$  and OUTPUT the first three values

```

1.4 测试用例

```

(base) C:\Users\DELL\Desktop\ComputingPhysics>python -u "c:\Users\DELL\Desktop\ComputingPhysics\6_1D-Kronig-Penney_FFT\KronigPenney.py"
The lowest three eigenvalues are
0.14509941886390567
1.51671794422695
1.8845263570149973

(base) c:\Users\DELL\Desktop\ComputingPhysics>

```

图 1: the lowest three eigenvalues

2 题目 2

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

本题要求读取 *sunspots.txt* 文件中的每个月份的太阳黑子的观测值，并进行 Fourier 变换，然后求出太阳黑子的活动周期。

本题的程序分为两个部分，首先读取从文件中读取月份数和太阳黑子的数量，然后调用 `fft` 库进行 Fourier 变换，并在 k 空间中画图并观察出有效的非 0 的峰值。

本题的源程序为 `sunspots_FFT/sunspots_FFT.py`，导入的第三方库有 `matplotlib`、`numpy` 以及 `numpy.fft.fft`。

2.3 伪代码

Algorithm 2 `sunspots_FFT`

```
1: for line in lines loaded from sunspots.txt do                                ▷ read the text file
2:   time, data  $\leftarrow$  line.split("")
3: end for
4:  $N \leftarrow \text{len}(\text{data})$ 
5:  $fs \leftarrow N$                                                                 ▷ sampling frequency
6:  $ts \leftarrow 1/fs$                                                             ▷ sampling period
7:  $freq \leftarrow [0 : 1 : ts] * fs$ 
8:  $\text{data\_fft} \leftarrow FFT(\text{data}, N)$ 
9: Plot the function  $\text{data\_fft}(freq)$  as  $freq$  changes
```

2.4 测试用例

绘制的 FFT 后的 k 空间的函数图像如图 2 所示。

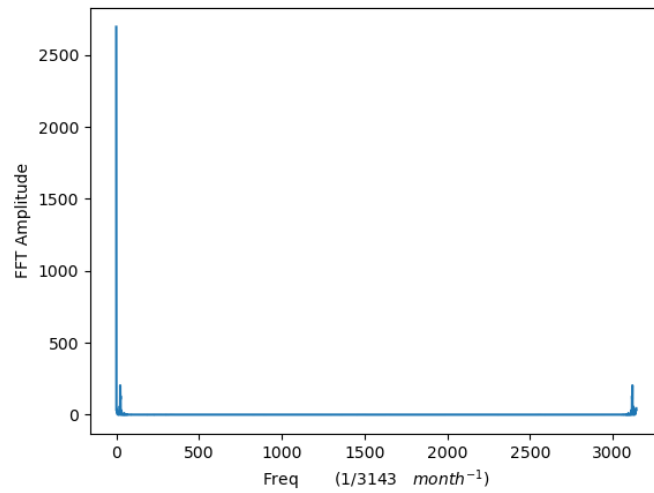


图 2: FFT

可以看到, $k = 0$ 时有一个峰, k 不为 0 时有两个峰, 呈对称分布。由 FFT 的特性, 前一半为真实频率, 所以从左往右的第三个峰不用考虑。

下面解释前两个峰。

首先绘制数据集如下。

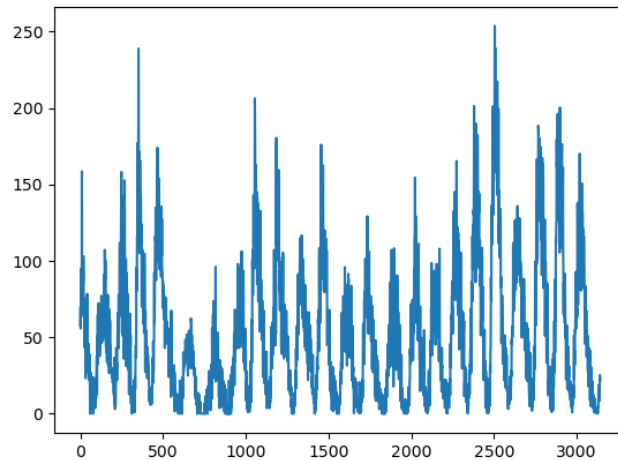


图 3: number of sunspots on the Sun for each month

函数呈现出一定的周期性, 且纵坐标关于 0 有偏置。

$k = 0$ 时的峰为直流项, 对应原函数纵坐标的偏置。而 k 不为 0 的那个峰, 即表征了函数的周期, 也是我们要寻找的那一项。

绘制 k 空间的前半部分, 去掉 $k = 0$ 的项, 结果如下图所示。

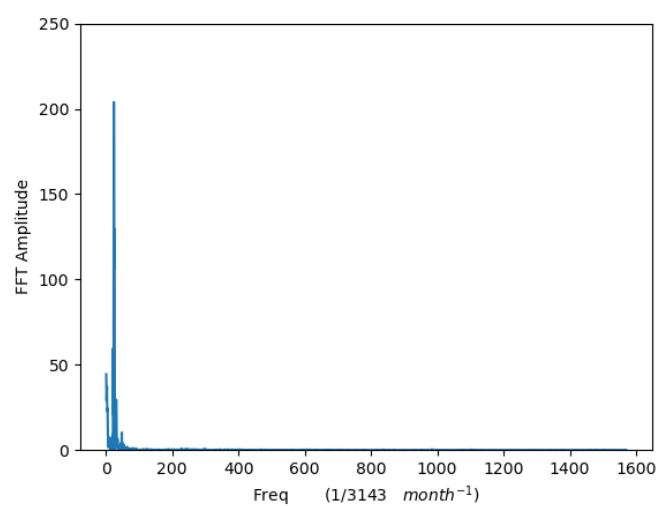


图 4: FFT – modified

最终可以读出 $k = 24/3143 \text{ month}(s)^{-1}$, 则周期 $T = 1/k = 3143/24 \text{ month}(s) = 130.96 \text{ month}(s) = 10.91 \text{ year}(s)$ 。即太阳黑子活跃大约以 11 年为一个周期。