

Wydział, kierunek: WFiIS, FT	Imię i nazwisko: Marcin Mikołajczyk	Rok: 4	Grupa: 1
Data wykonania: 20 października 2025	Data oddania: 20 października 2025	OCENA:	

## Laboratorium 2

### 1 Metoda czasu urojonego

Celem projektu było zbadanie stanów własnych jednowymiarowego Hamiltonianu  $\hat{H}$  w nieskończonej studni potencjału. Problem sprowadza się do rozwiązania równania Schrödingera:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

gdzie Hamiltonian ma postać  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ .

Zastosowana metoda czasu urojonego polega na iteracyjnym stosowaniu operatora  $(1 - \alpha\hat{H})$  na dowolną funkcję falową  $\Psi$ , co "wytlumia" składowe o wyższych energiach, pozostawiając stan podstawowy. Algorytm iteracyjny ma postać:

$$\Psi_{new} := (1 - \alpha\hat{H})\Psi_{old} \quad (2)$$

gdzie  $\alpha$  jest małym parametrem (krokiem czasowym).

#### 1.1 Implementacja numeryczna

Obliczenia przeprowadzono na dyskretnej siatce  $N = 300$  punktów, dla studni o szerokości  $L = 100$  nm. Działanie Hamiltonianu na funkcję falową na siatce przybliżono wzorem:

$$H\Psi(i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(i+1) + \Psi(i-1) - 2\Psi(i)}{\Delta x^2} + V_i\Psi(i) \quad (3)$$

W każdej iteracji funkcja falowa była normalizowana zgodnie z regułą:

$$I = \sum_{i=0}^N |\Psi(i)|^2 \Delta x, \quad \text{a następnie} \quad \forall_i \Psi(i) := \frac{\Psi(i)}{\sqrt{I}} \quad (4)$$

Dla tak znormalizowanej funkcji, wartość oczekiwaną energii obliczano jako:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=0}^N \Psi(i) H\Psi(i) \Delta x \quad (5)$$

Iteracje przerywano, gdy zmiana energii między krokami była mniejsza niż  $tol = 1 \times 10^{-6}$  meV:

$$|\langle E \rangle_{old} - \langle E \rangle_{new}| < tol \quad (6)$$

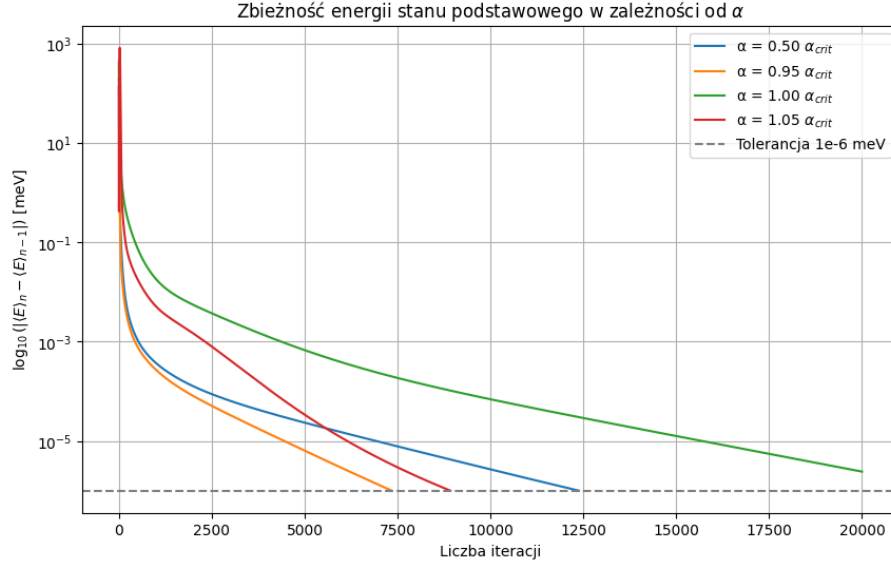
## 2 Zbieżność metody czasu urojonego

Zbadano zbieżność procesu dla różnych wartości  $\alpha$ .

Dla stałego potencjału, optymalna (i krytyczna) wartość tego parametru wynosi:

$$\alpha_0 = \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2} \quad (7)$$

Dla badanej siatki obliczono krytyczną wartość parametru  $\alpha_0$ , która wyniosła 2.658 230 a.u. (co odpowiada  $7.233\,470 \times 10^4 \text{ meV}^{-1}$ ).

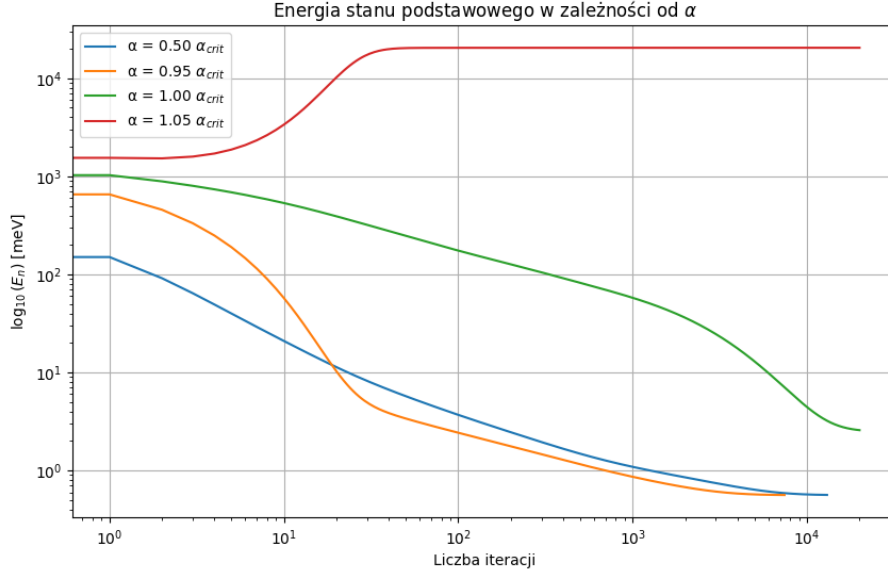


Rysunek 1: Zbieżność energii stanu podstawowego w zależności od  $\alpha$

W celu zbadania wpływu parametru  $\alpha$  na zbieżność, przeprowadzono symulacje dla trzech różnych wartości. Wyniki zebrano w Tabeli 1.

Tabela 1: Wyniki zbieżności dla różnych wartości  $\alpha$  (dla  $\alpha_0 \approx 2.658$ ).

$\alpha/\alpha_0$	Wartość $\alpha$ (a.u.)	Liczba iteracji	Uzyskana $E$ [meV]
$\approx 0.50$	1.329 115	12599	0.563809
$\approx 0.95$	2.525 319	7309	0.562512
$\approx 1.05$	2.791 142	10639	20472.9



Rysunek 2: Energia stanu podstawowego w zależności od  $\alpha$

Jak widać na Rysunku 2 oraz w Tabeli 1, dla wartości  $\alpha > \alpha_0$  (wiersz  $\approx 1.05$ ) metoda nie zbiega do stanu podstawowego, lecz do znacznie wyższej energii. Ze względu na skończoną precyzję obliczeń, konieczne jest stosowanie  $\alpha < \alpha_0$ . Obserwujemy, że im  $\alpha$  jest bliższe  $\alpha_0$  (porównując  $\approx 0.95$  z  $\approx 0.50$ ), tym liczba iteracji potrzebna do osiągnięcia zbieżności jest mniejsza (7309 vs 12599).

### 3 Pierwszy stan wzbudzony

Aby wyznaczyć pierwszy stan wzbudzony ( $\Psi_2$ ), należy zapewnić jego ortogonalność do wyznaczonego wcześniej stanu podstawowego ( $\Psi_1$ ). W tym celu po każdym kroku iteracji (2) stosowano procedurę ortogonalizacji Grama-Schmidta.

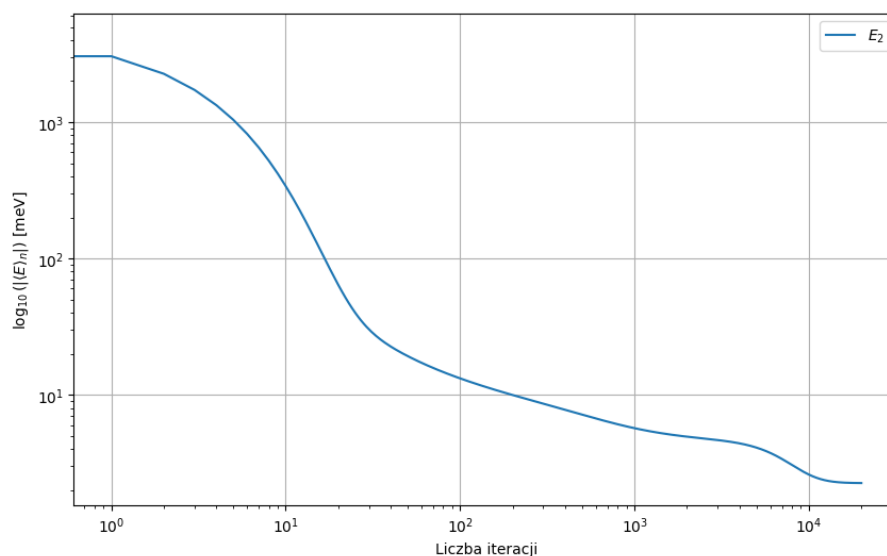
Najpierw obliczano rzut  $\Psi_2$  na  $\Psi_1$ :

$$c_1 = \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \sum_{i=0}^N \Psi_1(i) \Psi_2(i) \Delta x \quad (8)$$

A następnie odejmowano tę składową od  $\Psi_2$ :

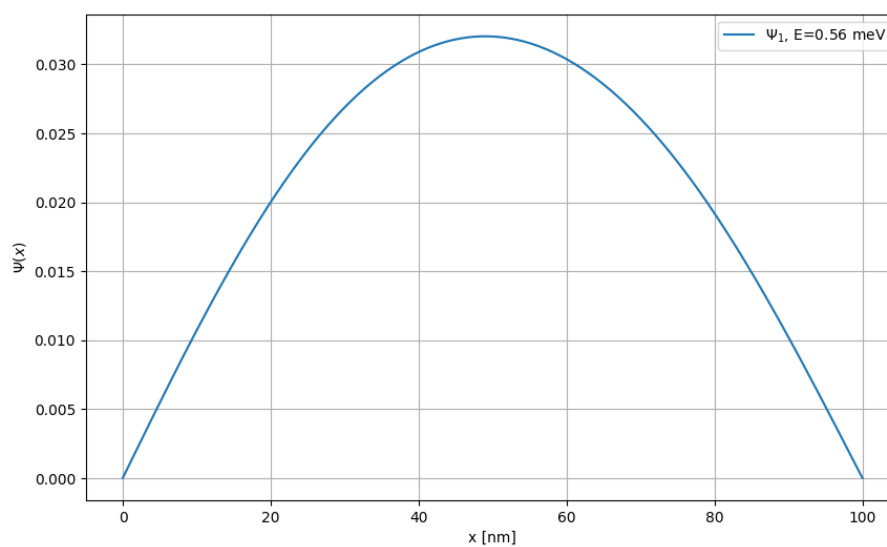
$$\Psi_2(i) := \Psi_2(i) - c_1 \Psi_1(i) \quad (9)$$

Proces zbieżności dla  $\alpha = 0.99 \cdot \alpha_0$  (Rysunek 3) był równie szybki jak dla stanu podstawowego.

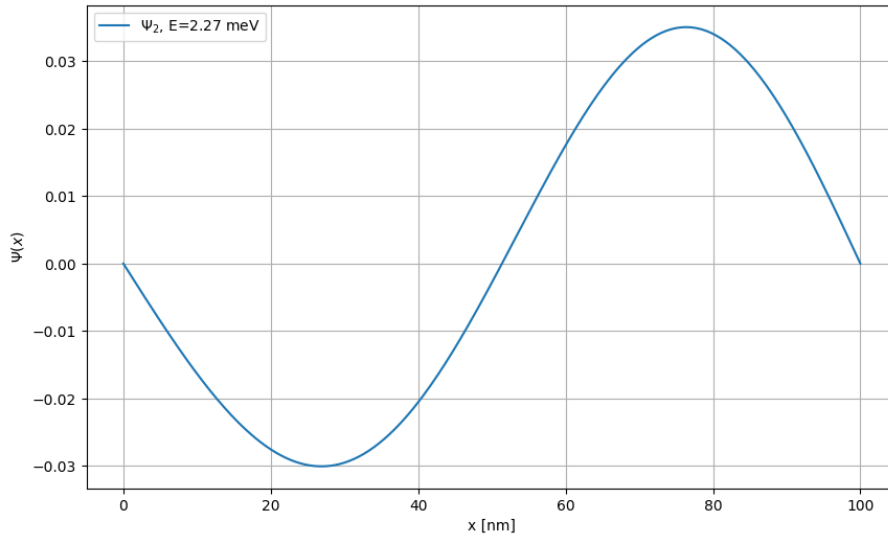


Rysunek 3: Zbieżność wartości oczekiwanej energii dla pierwszego stanu wzbudzonego ( $n = 2$ ).

Wyznaczona wartość energii wyniosła  $E_2 = 2.24317 \text{ meV}$ , co różni się od wartości teoretycznej o zaledwie 0.09%. Kształty funkcji falowych dla stanów  $n = 1$  (Rysunek 4) i  $n = 2$  (Rysunek 5) są zgodne z oczekiwaniami (brak węzłów dla  $n = 1$ , jeden węzeł dla  $n = 2$ ).



Rysunek 4: Funkcja falowa stanu podstawowego ( $n = 1$ ) w nieskończonej studni potencjału.

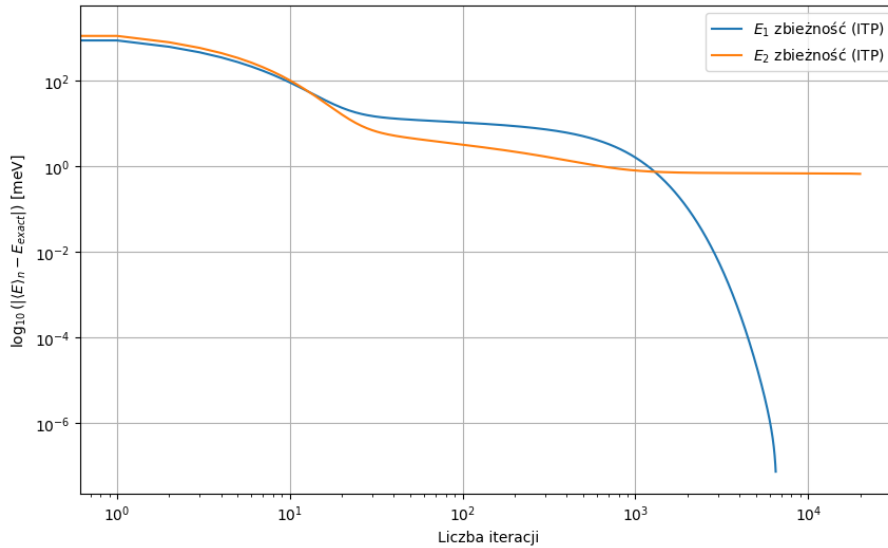


Rysunek 5: Funkcja falowa pierwszego stanu wzbudzonego ( $n = 2$ ) w nieskończonej studni potencjału.

#### 4 Nieskończona studnia potencjału z barierą

W ostatniej części zbadano stany własne w studni z dodatkową barierą potencjału umieszczoną pośrodku. Głębokość bariery wynosiła  $W = 500$  meV. Tolerancję zbieżności zaokrąglono do  $10^{-9}$  meV.

Zbieżność dla obu stanów w porównaniu z metodą strzałów przedstawiono na Rysunku 6.

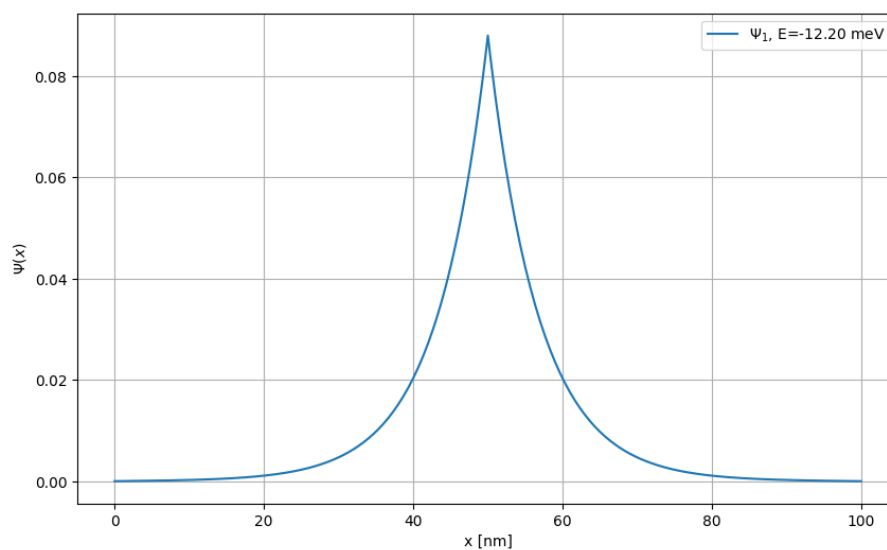


Rysunek 6: Zbieżność energii dla stanu podstawowego ( $n = 1$ ) i pierwszego stanu wzbudzonego ( $n = 2$ ) dla studni z barierą  $W = 500$  meV.

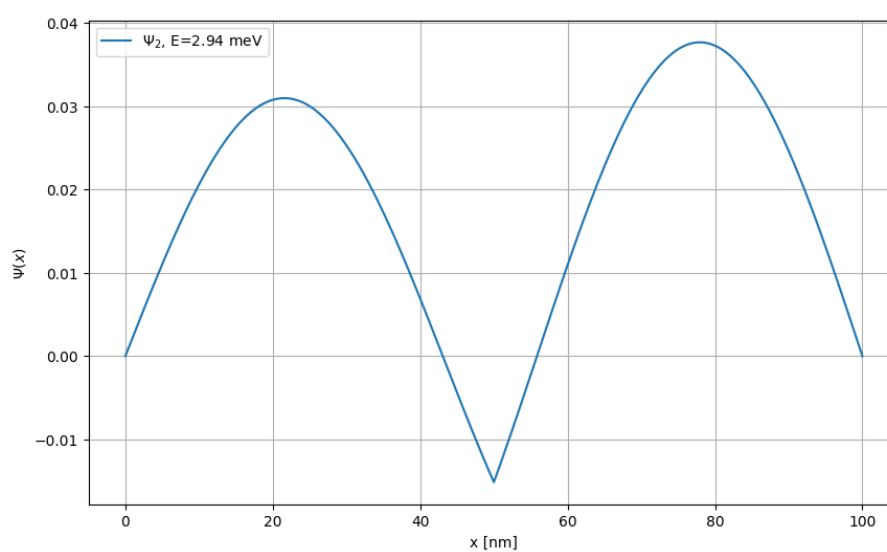
Uzyskano następujące wartości energii:

- **Stan podstawowy:**  $E_1 = -12.2036$  meV. Ujemna energia oznacza stan związany wewnątrz "bariery" (obniżenia potencjału).
- **Stan wzbudzony:**  $E_2 = 2.24517$  meV. Wartość ta jest, zgodnie z oczekiwaniami, niemal identyczna z energią  $E_2$  dla studni bez bariery. Dzieje się tak, ponieważ stan  $n = 2$  ma

węzeł w  $x = L/2$ , czyli tam, gdzie znajduje się bariera, przez co jest na nią "niewrażliwy". Funkcje falowe dla tego przypadku przedstawiono na Rysunkach 7 i 8.



Rysunek 7: Funkcja falowa  $\Psi_1(x)$  z barierą



Rysunek 8: Funkcja falowa  $\Psi(x)$  pierwszego stanu wzbudzonego ( $n = 2$ ) dla studni z barierą  $W = 500 \text{ meV}$ .

## Literatura

- [1] *Instrukcja do ćwiczenia UPEL MOFiT2, dostęp 20 października 2025*