

Computerphysik

Hausaufgabe 4

Sumin Kim : 32823221

26. Juni 2023

1

h01.c : 1.1.2

h021.c : 1.2.1

h022.c : 1.2.2

h023.c : 1.2.3

1.1 H1

Das bekannte Randwertproblem wird betrachtet.

$$u''(x) + g(x)u(x) = 0 \quad (1.1)$$

$$u(x_0) = u_0, u(x_1) = u_1 \quad (1.2)$$

Mit Operator D ist $u : Du = u'' + gu$ Die Eigenwertgleichung lautet:

$$Du_\lambda - \lambda u_\lambda = 0 \quad (1.3)$$

1.1.1 H1.1

Welche Bedeutung haben die Eigenfunktionen zu D mit homogenen Randbedingungen $u_0 = 0 = u_1$ für die Lösungen des inhomogenen Systems

$$Du(x) = \lambda u(x) + f(x), u(x_0) = a, u(x_1) = b \quad (1.4)$$

Das inhomogene System besteht aus zwei Lösungen: die homogene Lösung und die partikuläre Lösung. Die homogene Lösung bezieht sich auf die Lösungen der Eigenwertgleichung mit den gegebenen homogenen Randbedingungen. Diese Lösungen werden durch die Eigenfunktionen $u_\lambda(x)$ repräsentiert, wobei λ die Eigenwerte sind.

Die partikuläre Lösung hängt von der Funktion $f(x)$ ab und repräsentiert eine spezifische Lösung des inhomogenen Systems. Die allgemeine Lösung des inhomogenen Systems ist dann die Summe der homogenen Lösung und der partikulären Lösung.

Die Eigenfunktionen mit homogenen Randbedingungen ermöglichen es, die allgemeine Lösung des inhomogenen Systems zu konstruieren und die partikuläre Lösung zu ergänzen.

1.1.2 H1.2

In diesem Teil wurden die 10 betragsmäßig kleinsten Werte im Spektrum von D für den Fall $g(x) \equiv 0$ mit homogene Randbedingungen $x_0 = 0, x_1 = 60, u_0 = 0 = u_1$ mit Hilfe des Numerov-Verfahrens bestimmt. Mit diesem Eigenwerte wurden die Maximum der Näherungslösung mit inhomogene Randbedingungen $u_0=1, u_1=0$.

Numerov-Verfahren vorwärtsiteration wurde benutzt.[1]

$$y_i = \frac{1}{1 + \frac{h^2}{12}g_i} \left\{ 2 \left(1 - \frac{5}{12}h^2g_{i+1} \right) y_{i+1} - \left(1 + \frac{h^2}{12}g_{i+2} \right) u_{i+2} + \frac{h^2}{12} (s_i + 10s_{i+1} + s_{i+2}) \right\}$$

Das Programm **h01.c** benutzt $u(x_0) = 0$ und sehr kleine Zahl als Anfangsbedingung für das Numerov-Verfahren. Außerdem sind die Funktionen $s(x) = 0$ und $g(x) = \lambda$. λ wurde von 0.001 mit 0.001 Schritte erhöht.

In *numerov*-Funktion werden die $u(x)$ -Werte berechnet und die Werte werden weitergegeben. Um Eigenwert zu bestimmen wird es in *main* letzte u -Wert untersucht, was $u(x = 60)$ entspricht. Wenn die Randbedingung $u(x = 60) = 0$ erfüllt ist, ist die λ die Eigenwert.

Da meine Eigenwerte außerhalb von Erwartung lag, habe ich theoretische Werte dazu berechnet. Die theoretische Werte sind:

$$\begin{aligned} u''(x) + \lambda u(x) &= 0 \\ u(x) &= C_1 \sin(\sqrt{\lambda}x) + C_2 \cos(\sqrt{\lambda}x) \\ u(x=0) &= C_1 \sin(0) + C_2 \cos(0) = 0 \\ C_2 &= 0 \\ u(x=60) &= C_1 \sin(60 * \sqrt{\lambda}) = 0 \\ 60\sqrt{\lambda} &= \pi, 2\pi, \dots \\ \lambda &= \frac{\pi^2}{60^2}, \frac{2^2\pi^2}{60^2}, \dots \\ \lambda &= \frac{i^2\pi^2}{60^2}, i = 0, 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Nach der Bestimmung der Eigenwerte werden die inhomogene Differentialgleichung mit Randbedingung $u_0 = 1$ untersucht und maximale Näherungslösung bestimmt. Die Ergebnisse werden direkt in Terminal ausgegeben.

1.2 H2:Kronig-Penney Model

In diesem Teil wurde die quantenmechanischen Zustände der Valenzelektronen betrachtet.

$$-\frac{1}{2}\Delta\phi(x) + V(x)\phi(x) = \lambda\phi(x) \quad (1.5)$$

$$V(x) = V_{per}(x) = 60(\cos(\pi x))^{16}$$

mit Randbedingung $\phi(0) = 0 = \phi(L)$, wobei die Kristallgitter Länge ist.

1.2.1 H2.1

Die gegebene Gleichung ist :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\Delta\phi(x) + V(x)\phi(x) &= \lambda\phi(x) \\ \frac{1}{2}\phi''(x) + \lambda\phi(x) &= 60(\cos(\pi x))^{16}\phi(x) \\ \phi''(x) + (2\lambda - 120(\cos(\pi x))^{16})\phi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Also gilt es $g(x) = 2\lambda - 120(\cos(\pi x))^{16}$ und $s(x) = 0$. Außerdem gilt es Randbedingung $\phi(0) = 0 = \phi(L)$ und L ist 8.

Das Programm **h021.c** funktioniert ähnlich wie die **h01.c**. Für Numerov-Verfahren wurde $\phi(0) = 0$ und sehr kleiner Wert als Anfangsbedingung genutzt. Um Eigenwert zu bestimmen wurde die letzte Wert bzw. $\phi(L)$ untersucht, ob es Randbedingung $\phi(L) = 0$ erfüllt. Wegen Laufzeit wurde die Schritte für $\lambda = 0.01$ benutzt.

Die Eigenwerte sind direkt auf dem Terminal ausgegeben und in Txt-Datei gespeichert.

Die Eigenwerte sind nicht kontinuierlich sondern zeigt es Band und Bandlücke wie Abbildung 1.1. Die Eigenwerte sind in *h2_eigenwerte.txt* gespeichert.

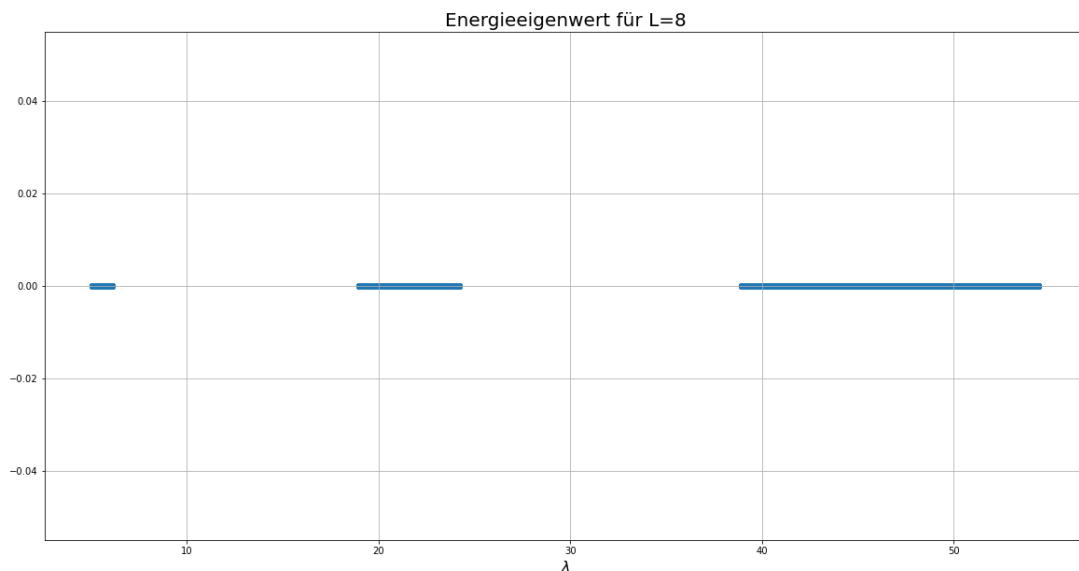


Abbildung 1.1: Eigenwerte

Außerdem wurden die auf 1 normierte Zustände unterhalb und oberhalb der Bandlücke untersucht. Die Werte sind in *h2_Band_num.txt* gespeichert.

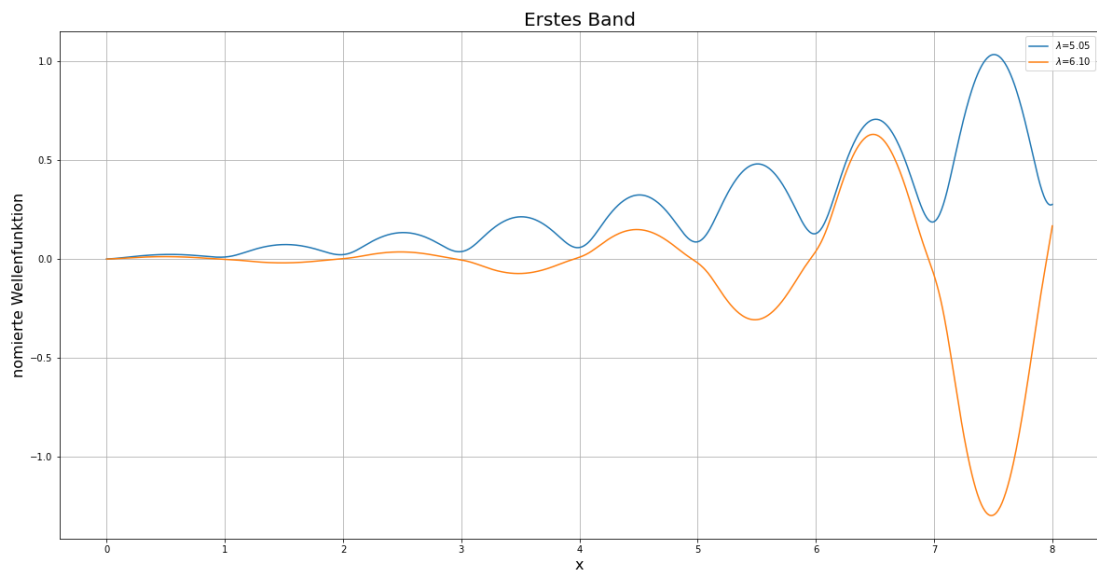


Abbildung 1.2: erstes Band

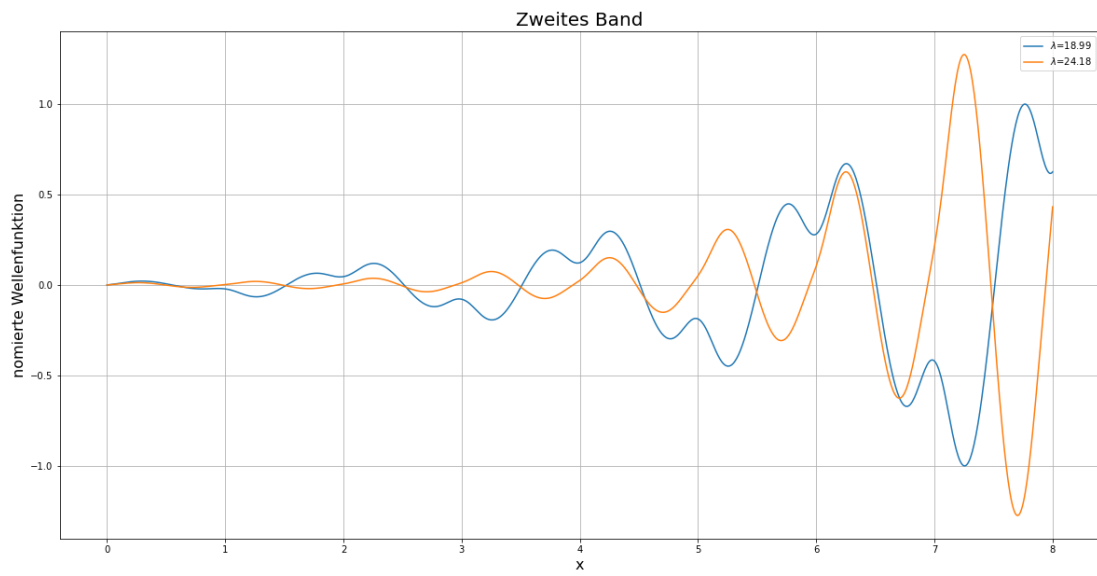


Abbildung 1.3: zweites Band

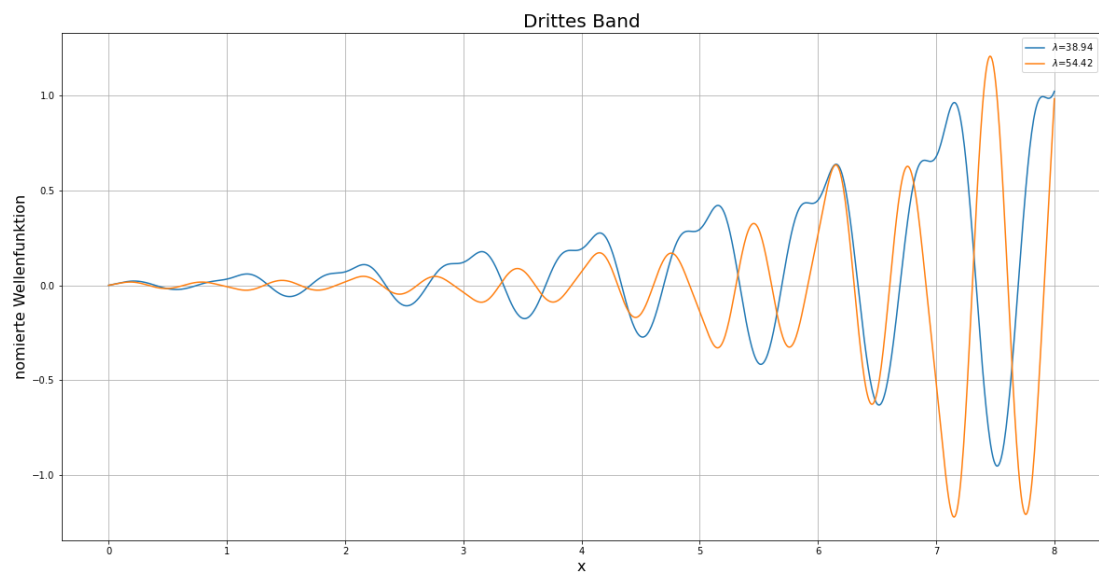


Abbildung 1.4: drittes Band

1.2.2 H2.2

Die kleine Länge L des Kristalls ergibt eine systematische Unsicherheit (finite size effect) gegenüber einer realistischen Kristallgröße. Prüfen Sie die Abhängigkeit der Bandstruktur aus Aufgabenteil 1 von der Länge L für $L = 16, 32, 64$.

Das Programm **h022.c** wurde nur in *main* die Werte für L geändert. Die Ergebnisse sind in *h22_L_eigenwerte.txt* gespeichert.

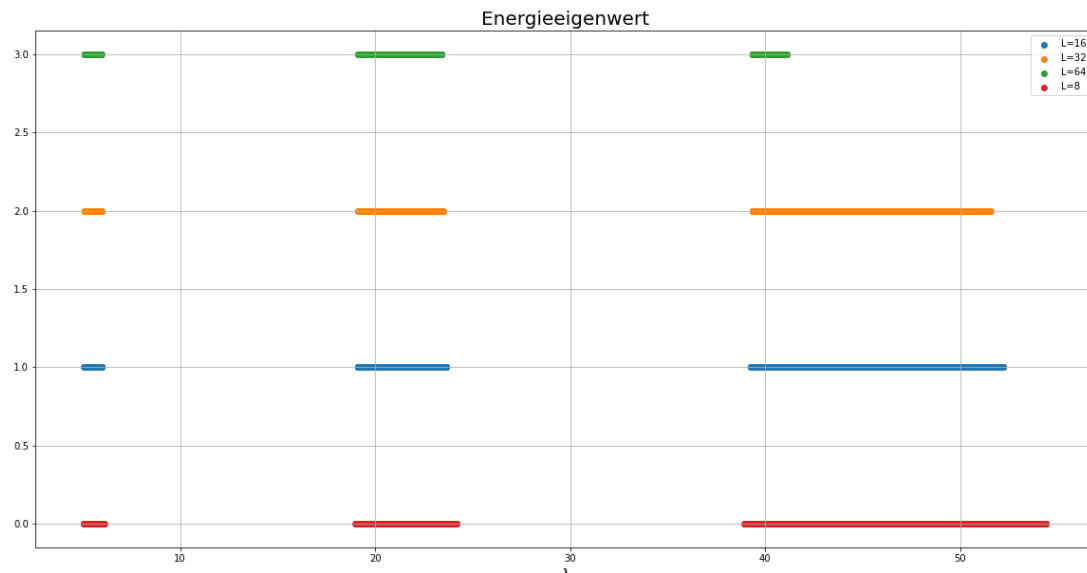


Abbildung 1.5: Eigenwerte verschiedene L

Die Höhe der Band wurde nur für bessere Sichtbarkeit benutzt aber es hat keine physikalische Bedeutung. Genauso wie H2.1 zeigen die Eigenwerte Bandstruktur aber je größer L ist, desto kleiner die Bandlänge.

1.2.3 H2.3

In diesem Teil wurde der Einfluss eines äußeren konstanten elektrischen Feld ϵ auf die Struktur des Spektrums untersucht und die ersten beiden Bandlücken als Funktion der Feldstärke ϵ dar. Es gilt $g(x) = 2\lambda - 120(\cos(\pi x))^{16} - x\epsilon$ und $s(x) = 0$.

Auf der Email von Prof. Petschlies ist es gefragt, dass ca. 10 ϵ zu scannen aber wegen Segmentation Fault habe ich nur drei Werte untersucht. $\epsilon = 0.1, 1.0, 2.0$

Zum Vergleichen mit ersten Teil wurde $L = 8$ genommen. Die Eigenwerte werden nicht in Editor gezeigt sondern nur in *h23_Bandluecke_epsilon.txt*

Man kann erkennen, dass die äußere Feldstärke die Bandstruktur ändert.

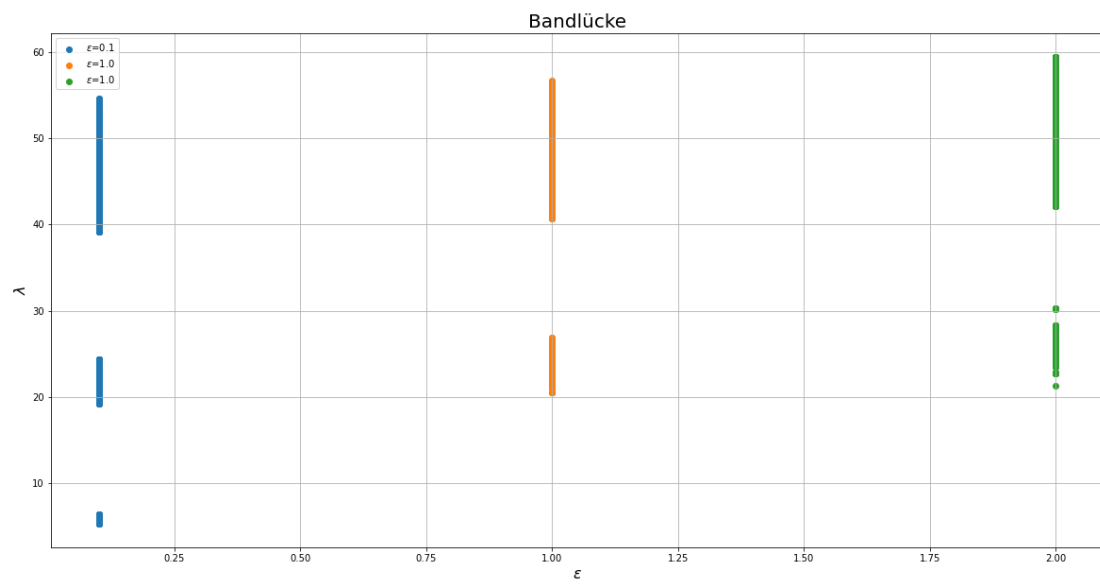


Abbildung 1.6: Bandstruktur vs äußere elektrische Feld

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|---|---|
| 1.1 | Eigenwerte | 4 |
| 1.2 | erstes Band | 5 |
| 1.3 | zweites Band | 5 |
| 1.4 | drittes Band | 6 |
| 1.5 | Eigenwerte verschiedene L | 7 |
| 1.6 | Bandstruktur vs äußere elektrische Feld | 8 |

Literatur

- [1] M.Petschlies. *physik441 Computerphysik — Vorlesung 10*. URL: https://ecampus.uni-bonn.de/goto_ecampus_file_3053861_download.html.