Homework No.5

Ruqi Feng

November 2022

1 One-dimensional Kronig-Penney problem

1.1 Description

Find the eigenstates with the lowest 3 energies for a particle in a periodic potential, which is shown in Fig.1. $a = 1\text{nm}$, $U_0 = 2\text{eV}$, $L_W = 0.9\text{nm}$ and $L_B = 0.1\text{nm}$. Use basis $|\psi_q\rangle = e^{i\frac{2\pi q}{a}x}$. Calculate the eigenvalues.

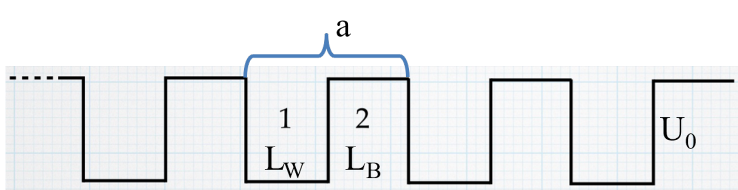

图 1: Kronig-Penney 问题中的周期性势能

1.2 Solution

在基 $e^{i\frac{2\pi q}{a}x}$ 下，$\hat{H}$ 可以利用 FT 方便地计算。动能 $\langle\hat{T}\rangle_{pq}$

$$\langle\psi_p|\hat{T}|\psi_q\rangle = \langle\psi_p| - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi_q\rangle \tag{1}$$

$$= \langle\psi_p|\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2 q^2}{a^2}|\psi_q\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2 q^2}{a^2}\langle\psi_p|\psi_q\rangle \tag{2}$$

$$= \frac{2\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2}\langle\psi_p|\psi_q\rangle \tag{3}$$

调整 ψ_q 的系数，使内积归一化[1]，于是

$$\langle\psi_p|\psi_q\rangle = \delta_{p,q} \tag{4}$$

利用 Eq.4可得

$$\langle\hat{T}\rangle_{pq} = \frac{2\hbar^2\pi^2q^2}{ma^2}\delta_{p,q} \tag{5}$$

只有对角元受到动能的贡献。

而对于 $\hat{H}$ 中的势能 $\langle\hat{V}\rangle_{pq}$，用 Fourier 级数展开势能，可得 $V(x) = \sum_{q'} c_{q'}e^{i\frac{2\pi q'}{a}x}$，于是

$$\langle\psi_p|\hat{T}|\psi_q\rangle = \langle\psi_p|V|\psi_q\rangle \tag{6}$$

$$= \langle\psi_p|\sum_{q'} c_{q'}e^{i\frac{2\pi q'}{a}x}|\psi_q\rangle \tag{7}$$

注意到 $e^{i\frac{2\pi k}{a}x}|\psi_q\rangle = |\psi_{q+k}\rangle$，可以把 Eq.6中的 V 吸收进 $|\psi\rangle$ 中，然后再利用 Eq.4可得

$$\langle\hat{V}\rangle_{pq} = c_{q'}\delta_{q+q',p} = c_{p-q} \tag{8}$$

只需算出 $c_{q'}$，即势能的 Fourier 系数，再选定基的范围，就能得到 $\langle\hat{H}\rangle$ 矩阵，并解得本征值。我们选择基的 $q \in [-N, N]$，因此由 Eq.8可知，q' 的范围是 $[-2N, 2N]$。在势能的一个周期内采样并进行 DFT 便可以得到各个 $c_{q'}$：

$$c_{q'} = \sum_{k=0}^{4N} V(\frac{k}{4N+1}a)e^{i\frac{2\pi q'k}{4N}} \tag{9}$$

因此就知道了

$$\langle\hat{H}\rangle_{ij} = c_{i-j} + \frac{2\hbar^2\pi^2q^2}{ma^2}\delta_{i,j} \tag{10}$$

对 Eq.10求本征值即为能量。

1.3 Input and Outputs

取 $N = 100$，计算出的 H 如 fig.2, Fig.3所示：对 $\langle\hat{H}\rangle$ 求本征值，打印前 5 个最小值，结果如 fig.5所示。最小的三个能量是

[1] 这里正交是显然的。内积必须归一化，否则 $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \neq \langle\hat{H}\rangle$，计算出的本征能量也会相差一个系数。但我还是没懂，这里的内积显然不能定义成 $\int_{\infty}^{\infty}$，但该怎么定义呢？从结果上看 $\int_0^a$ somehow works，但是什么道理呢？

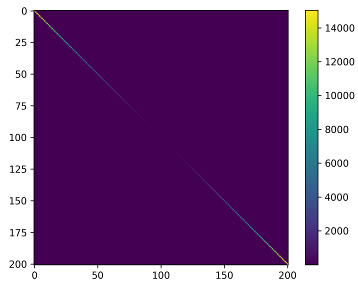

图 2: 动能矩阵各元素模

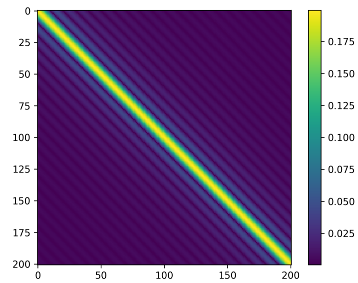

图 3: 势能矩阵各元素模

n	E/eV
1	0.14432
2	1.51638
3	1.88196

事实上，可以发现动能矩阵元在对应大动量时模很大，如果 N 取得过大，除了使效率降低外，还可能导致浮点数溢出。由于 $\hat{H}$ 是个 Hermite 矩阵，本征值是实的，这说明解得的本征能量应该是实数。

如果调整 L_W/L_B，可以发现会有在某些时候会有简并态出现，如 Fig,4所示。由于时间问题，我还没有能对此进行解释。

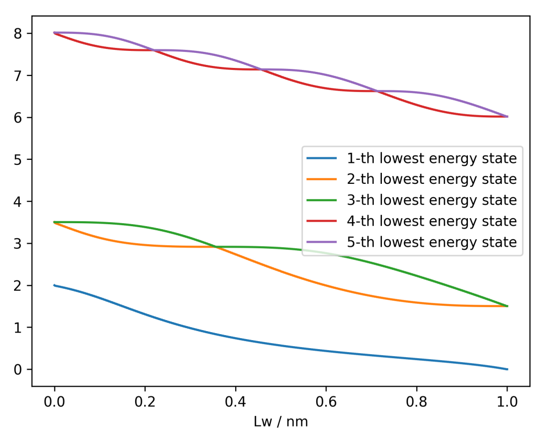

图 4: 不同 L_W/L_B 时的能量 (eV)

程序使用了 numpy, matplotlib 和 scipy 库。在安装了依赖库的环境中运行 q1_FFT.py 即可。下面是程序运行的截图。

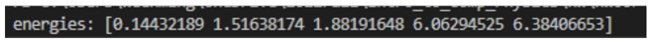

图 5: 程序运行截图

1.4 Pseudocode

Algorithm 1 Kronig-Penney Problem

Input: $V(x)$
Output: Eigenvalues E_i

$N \leftarrow 100$
$c_{p'} \leftarrow$ FFT of $(V(\text{linspace}(0, 1, 4N + 1)))$
for i in range$(2N + 1)$ **do**
    for j in range$(2N + 1)$ **do**
        $V_{ij} \leftarrow c_{i-j}$
        if $i == j$ **then**
            $T_{ij} \leftarrow \frac{2\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2}$
        else
            $T_{ij} \leftarrow 0$
        end if
        $H_{ij} \leftarrow T_{ij} + V_{ij}$
    end for
end for
$E \leftarrow$ eigenvalues of H
return E

2 Sunspots

2.1 Description

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.

2.2 Solution

利用 FFT 进行计算。我们知道 DFT 可以表示为

$$f_k(k) = \sum_m f(\frac{k}{N}L)e^{-i\frac{2\pi km}{N}} \tag{11}$$

计算它的时间复杂度为 $O(N)$。注意到

$$\sum_{k=1}^{N-1} f_k e^{-i2\pi\frac{jk}{N}} = \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2k} e^{-i2\pi\frac{jk}{N/2}} - e^{-i\frac{2\pi j}{N}} \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2k+1} e^{-i2\pi\frac{jk}{N/2}} \tag{12}$$

所以可以把 f_k 的 $O(N)$ 的计算分解成两个 $N \to \frac{N}{2}$ 的 f_k 的计算，但是由于后者被 f_k 和 $f_{k+\frac{N}{2}}$ 共享，所以平均而言计算用的时间是 $T(N) = T(\frac{N}{2}) + 1$，递推可得 $T(N) = \log_2 N$。所有 f_k 总用时为 $N \log_2 N$。

在本题目中，目标的频率和采样周期相比较小，分辨率不高，所以可以采用零延拓的方式增加低频下的分辨率。由 Eq.11可知，零延拓不会改变零延拓前的 FFT 的值，只会在延拓前的频谱采样点之间增加新的点，等价于在频谱中以更高分辨率进行采样。

为了探测周期，我们利用简单的寻峰算法寻找满足 $f(x_i) > f(x_{i-1})$ and $f(x_i) > f(x_{i+1}$ 的 $f(x_i)$ 作为找到的频率。

2.3 Input and Outputs

直接对时域信号进行 FFT，结果如 Fig.6所示，找到了一个峰在 $k = 0.0076360\ \mathrm{month}^{-1}$，对应周期 10.91 年，这是得到的太阳黑子的活动周期。进行零延拓再 FFT 后，计算得到的周期为 10.99 年，和实际值更加接近。可以发现，零延拓有助于提高频率谱的分辨率。

在零延拓的功率谱中，可以发现零频附近也出现了一些峰，但是如图中灰色区域标出的，一些较小的空间频率事实上是没有意义的–我们不能相信一段长度为 T 的信号能检测出周期为 $2T$ 的分量！但是还是灰色区域以外的那些峰有可能有一定意义，但比起找到的峰，它们的贡献不大。这是因为

周期为 11 年附近的峰虽然峰值和零频附近的峰值相近，但更宽，包含更多”能量”，说明它们对太阳黑子周期性变化的贡献较大。

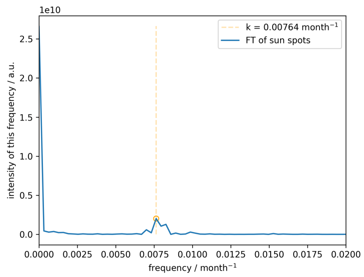

图 6: 没有经过零延拓的功率谱

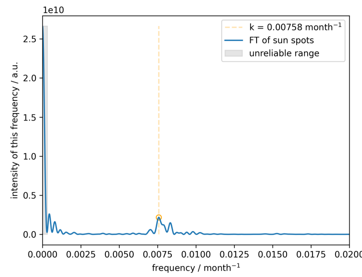

图 7: 经过零延拓的功率谱

程序使用了 numpy 和 matplotlib 库。在安装了依赖库的环境下运行 `sunspots.py` 即可。

2.4 Pseudocode

Algorithm 2 Sunspots

Input: a discrete time-series intensity signal $I(t)$, lower bound of peak intensity m, lower bound of peak frequency l

Output: peak frequency

$N \leftarrow \text{len}(I)$

$y \leftarrow$ FFT of I

$y \leftarrow y^2$ (element-wise-square)

while $y[i] < m$ or $i < l$ **do**

  $i \leftarrow$ index of next peak in y

end while

$f \leftarrow \frac{i}{N}$ (month^{-1})

Return: f