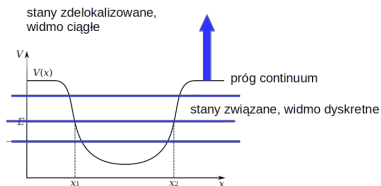


Równanie Schroedingera 1D: rozwiązania dla stanów związanych

6 października 2022

równanie własne H

- ciągła i dyskretna część widma energii



- (1) stany zlokalizowane – dyskretna część widma (stany atomowe, studnie kwantowe)
- (2) stany zdelokalizowane – ciągła część widma (stany rozproszeniowe, stany niosące prąd, stany Blocha w kryształach)
- wykład – zaczynamy od problemów (1) dla 1D

równanie własne H

- stany stacjonarne spełniają niezależne od czasu równanie Schroedingera \equiv równanie własne operatora energii
- $H\Psi_n = E_n\Psi_n$
- zakładamy, że potencjał niezależny od czasu i problem 1D
- $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$
- $p = -i\hbar\nabla \rightarrow_{1D} p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
- $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

stany związane

- $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right]\psi = E\psi$$

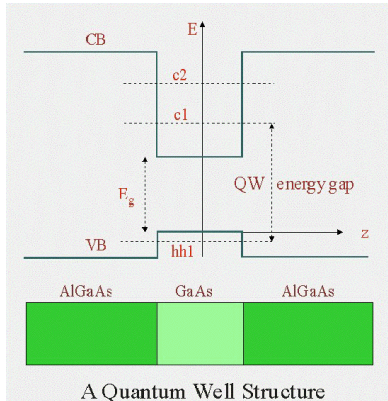
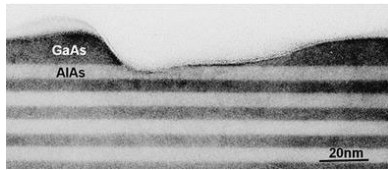


- stany związane – dyskretna część widma (stany atomowe, studnie kwantowe)
- energia poniżej progu continuum
- próg continuum: minimalna energia cząstki daleko od wnętrza potencjału

- dla $V(x \rightarrow \pm\infty) = 0$, próg continuum: $E_{cont} = 0$:
- stany związane $E < 0$ - potrzebna energia aby cząstkę uwolnić ze stanu związanego
- stany związane: $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$
- więc $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- ψ - ciągła z pochodną, całkowalna z kwadratem, skończona

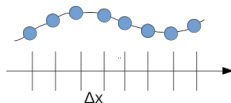
studnia kwantowa

- 1970': epitaksja molekularna, struktury produkowane z wykorzystaniem materiałów półprzewodnikowych o podobnej strukturze krystalicznej (gładki wzrost) i różnych przerwach energetycznych.
- Podstawowe problemy MQ, rozważane przed II WŚ - zastosowanie do układów produkowanych od lat 80 XXw.
- obecnie: diody, lasery, procesory
- problemy rozwiązywane na wstępie do mechaniki kwantowej, odpowiadają elektronom z pasma przewodnictwa z masą efektywną $m^* = 0.067m_0$. Wysokość bariery dla pasma przewodnictwa: 10meV na każdy procent Al w stopie, szerokość rzędu 10-100 nm.



równanie Schroedingera w 1D metoda różnic skończonych

- niezależne od czasu równanie Schroedingera
- $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ (równanie własne operatora energii)
- $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$
- $\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = \frac{\Psi(x-\Delta x) + \Psi(x+\Delta x) - 2\Psi(x)}{\Delta x^2} + \frac{\Delta x^2}{24} f^{(4)}(\xi)$



- $\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) \simeq \frac{\Psi(x-\Delta x) + \Psi(x+\Delta x) - 2\Psi(x)}{\Delta x^2}$

- algebraiczne równanie własne

- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x-\Delta x) + \Psi(x+\Delta x) - 2\Psi(x)}{\Delta x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$

- $x_j = j\Delta x + x_0, \Psi(x_j) \equiv \Psi_j, V(x_j) \equiv V_j$

- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{j-1} + \Psi_{j+1} - 2\Psi_j}{\Delta x^2} + V_j\Psi_j = E\Psi_j$

- Wzór można przepisać

- $\Psi_{j+1} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_j)\Delta x^2\Psi_j - \Psi_{j-1} + 2\Psi_j$

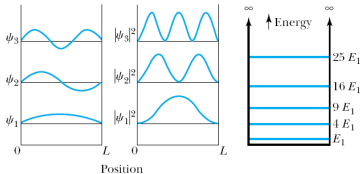
- aby wykorzystać: potrzebna funkcja w dwóch punktach Ψ_j oraz Ψ_{j+1} oraz energia E , wyliczymy funkcję falową dla następnych x

- problem 1): skąd Ψ_j, Ψ_{j+1} ?

- problem 2) skąd E ? (w dyskretnej części widma, nie dla każdej E istnieje stan własny)

nieskończona studnia potencjału

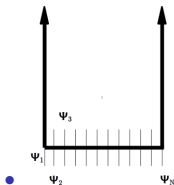
- znane rozwiązanie analityczne
- $V(x) = 0$ dla $x \in (0, L)$ oraz $V(x) = \infty$ dla $x \notin (0, L)$
- $H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$
- Gdzie potencjał nieskończony $\psi(x) = 0$
- wewnątrz studni: $H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x)$ - jak w próżni
- $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- ale warunek brzegowy: $\psi(0) = \psi(L) = 0 \rightarrow A = 0, k_n L = n\pi$
- ograniczenie przestrzenne: kwantyzacja wartości własnych energii
- $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$, $\psi_n = B \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$
- n - liczba kwantowa, $n = 1$ - stan podstawowy, $n > 1$ stany wzbudzone.



metoda różnic skończonych dla nieskończonej studni potencjału

- $x_i = i\Delta x$, $\Psi(x_i) \equiv \Psi_i$, $V(x_i) \equiv V_i$
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{i-1} + \Psi_{i+1} - 2\Psi_i}{\Delta x^2} + V_i \Psi_i = E \Psi_i$

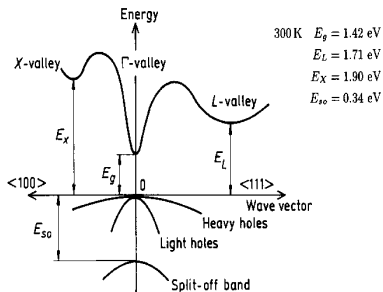
- $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x \in (0, L) \\ \infty & \text{dla } x \notin (0, L) \end{cases}$
- N oczek siatki, $\Delta x = \frac{L}{N-1}$
- $\Psi_{i+1} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i) \Delta x^2 \Psi_i - \Psi_{i-1} + 2\Psi_i$ (*)
- $\Psi_1 = 0$ (bo tak)
- $\Psi_N = 1$ (bo znormalizować można potem)
- wewnątrz studni $V_i = 0$
- E jest do zaakceptowania jeśli $\Psi(L) = \Psi_N = 0$



metoda różnic skończonych dla nieskończonej studni potencjału

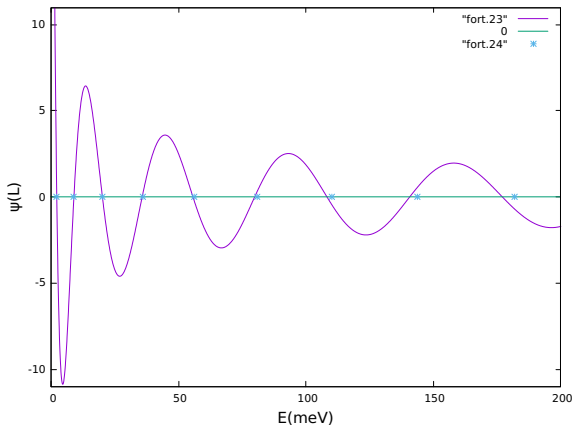
- $\Psi_{i+1} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i)\Delta x^2\Psi_i - \Psi_{i-1} + 2\Psi_i$

- jednostki atomowe, rachunek dla elektronów z pasma przewodnictwa w GaAs
 $m = m^* m_0$, $m^* = 0.067$, $L = 50$ nm
 $= 944.82 a_B$, $a_B = 0.05292$ nm.
- jednostka energii $2Ry = 27.2116$ eV.
- $E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$



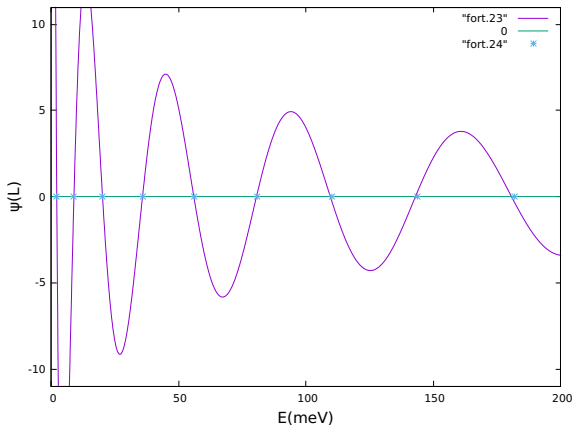
metoda różnic skończonych dla nieskończonej studni potencjału

- Studnia nieskończona, $L = 50$ nm, 51 oczek siatki. Rysunek: Ψ_N dla $N = 51$.
- krzyżyki: $E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$



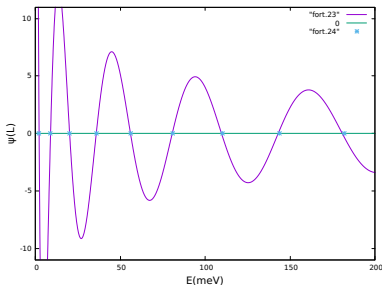
metoda różnic skończonych dla nieskończonej studni potencjału

- Ψ_N dla $N = 101$



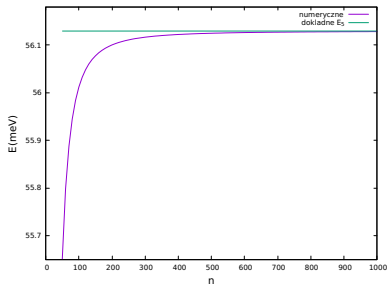
metoda różnic skończonych dla nieskończonej studni potencjału

- ψ_N dla $N = 101$

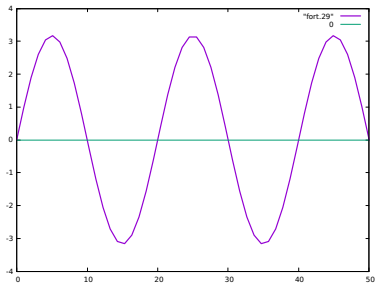


- warunek $\psi(L, E_n) = 0$ wskazuje dyskretne wartości energii, dla których rozwiązania równania różnicowego odpowiadają stanom własnym Hamiltonianu i energie własne E_n
- dokładna wartość energii : metoda strzałów

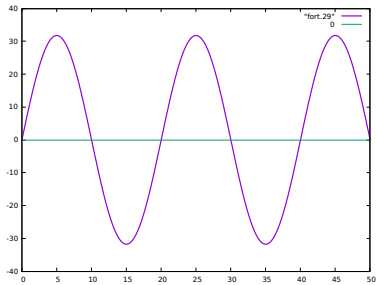
- zbieżność wyników numerycznych w funkcji liczby punktów siatki N dla 5-tego stanu



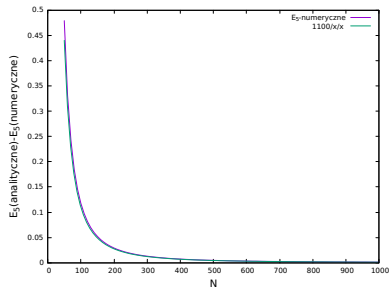
- ψ_5 dla $N = 50$



- ψ_5 dla $N = 500$



- $n = 5$: zbieżność wyników numerycznych w funkcji liczby punktów siatki (na osi pionowej meV)



- zbieżność $O(N^{-2})$ czyli $O(\Delta x^2)$

do wyższej dokładności

- $y(x + \Delta x) =$
 $y(x) + \Delta x y'(x) + \frac{\Delta x^2}{2} y''(x) + \frac{\Delta x^3}{3!} y'''(x) + \frac{\Delta x^4}{4!} y^{iv}(x) + \frac{\Delta x^5}{5!} y^v(x) + \frac{\Delta x^6}{6!} y^{vi}(x) + O(\Delta x^7)$
- $y(x - \Delta x) =$
 $y(x) - \Delta x y'(x) + \frac{\Delta x^2}{2} y''(x) - \frac{\Delta x^3}{3!} y'''(x) + \frac{\Delta x^4}{4!} y^{iv}(x) - \frac{\Delta x^5}{5!} y^v(x) + \frac{\Delta x^6}{6!} y^{vi}(x) + O(\Delta x^7)$
- $y(x + \Delta x) + y(x - \Delta x) = 2y(x) + \Delta x^2 y''(x) + \frac{\Delta x^4}{12} y^{iv}(x) + \frac{\Delta x^6}{360} y^{vi}(x) + O(\Delta x^8)$
- $\frac{y(x+\Delta x) - 2y(x) + y(x-\Delta x)}{\Delta x^2} = y''(x) + \frac{\Delta x^2}{12} y^{iv}(x) + \frac{\Delta x^4}{360} y^{vi}(x) + O(\Delta x^8)$
- ogólnie stosowalny iloraz różnicowy
- $\frac{y(x+\Delta x) - 2y(x) + y(x-\Delta x)}{\Delta x^2} = y''(x) + O(\Delta x^2)$

do wyższej dokładności

- ogólny przepis dla gładkiej funkcji:

$$\frac{y(x+\Delta x)-2y(x)+y(x-\Delta x)}{\Delta x^2} = y''(x) + \frac{\Delta x^2}{12} y^{iv}(x) + \frac{\Delta x^4}{360} y^{vi}(x) + O(\Delta x^8)$$

- dla równania typu: $y''(x) = s(x) - g(x)y(x)$ (*) czwartą pochodną $y(x)$ możemy policzyć tak:

- $y^{iv}(x) = (s(x) - g(x)y(x))''$

- $y^{iv}(x) = \frac{s(x+\Delta x) - g(x+\Delta x)y(x+\Delta x) + s(x-\Delta x) - g(x-\Delta x)y(x-\Delta x) - 2s(x) + 2g(x)y(x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$

- $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{12}(s_{n+1} - 2s_n + s_{n-1}) + \frac{1}{12}(y_{n-1}g_{n-1} - 2y_n g_n + y_{n+1}g_{n+1}) + O(\Delta x^4)$

- zastosowanie do równania typowego (*)

- $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{12}(s_{n+1} - 2s_n + s_{n-1}) + \frac{1}{12}(y_{n-1}g_{n-1} - 2y_n g_n + y_{n+1}g_{n+1}) = s_n - g_n y_n$

- czyli

- $\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{12}(s_{n+1} + 10s_n + s_{n-1}) + \frac{1}{12}(y_{n-1}g_{n-1} + 10y_n g_n + y_{n+1}g_{n+1}) = 0$

metoda Numerowa

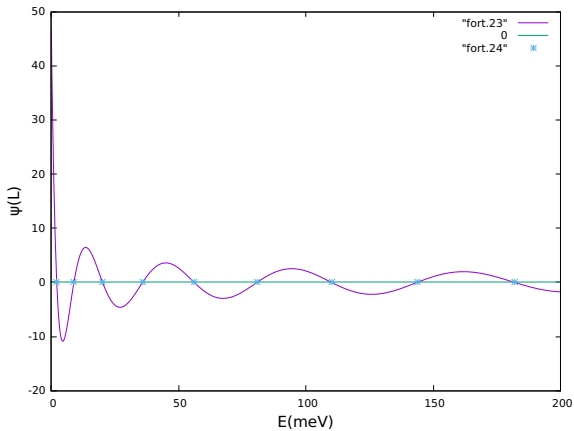
- $y''(x) = s(x) - g(x)y(x)$
- $\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{12}(s_{n+1} + 10s_n + s_{n-1}) + \frac{1}{12}(y_{n-1}g_{n-1} + 10y_n g_n + y_{n+1}g_{n+1}) = 0$

Metoda Numerowa do Schrodingera

- równanie typu: $y''(x) = s(x) - g(x)y(x)$ (*)
- $\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{12}(s_{n+1} + 10s_n + s_{n-1}) + \frac{1}{12}(y_{n-1}g_{n-1} + 10y_n g_n + y_{n+1}g_{n+1}) = 0$
- R. S. $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V(x))\psi$ czyli $s = 0, g = 2m^*(E - V(x))/\hbar^2$
- dla ∞ studni V znika wewnątrz
- przepis Numerowa:
- $\psi_{n+1} = (1 + \frac{\Delta x^2}{6} m^* E / \hbar^2)^{-1} [2\psi_n - \psi_{n-1} - \frac{\Delta x^2}{6\hbar^2} \psi_{n-1} m^* E - \frac{5\Delta x^2}{3\hbar^2} \psi_n m^* E]$
- przepis z ogólnej dyskretyzacji drugiej pochodnej:
- $\psi_{n+1} = -\frac{2m^* E}{\hbar^2} \Delta x^2 \psi_n - \psi_{n-1} + 2\psi_n$ (*)
- Numerow: $\psi_{n+1} = \sum_{k=0} \left(-\frac{\Delta x^2}{6\hbar^2} m^* E\right)^k [2\psi_n - \psi_{n-1} - \frac{\Delta x^2}{6\hbar^2} \psi_{n-1} m^* E - \frac{5\Delta x^2}{3\hbar^2} \psi_n m^* E]$

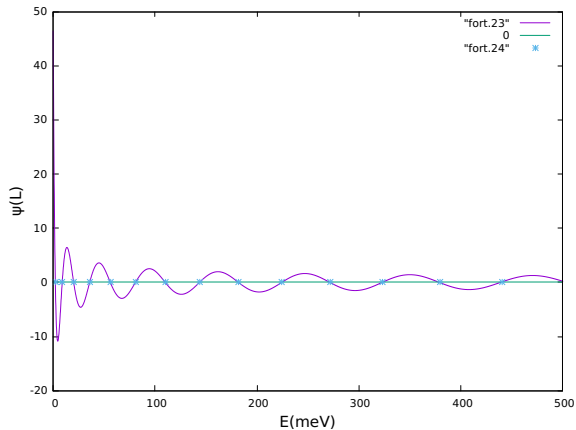
metoda Numerova

- $N = 51$



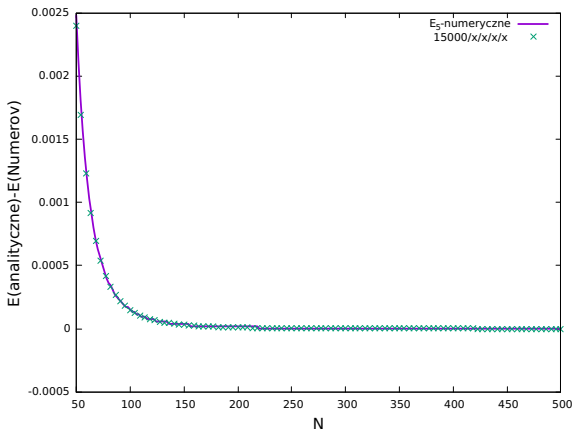
metoda Numerowa

- $N = 51$



metoda Numerowa

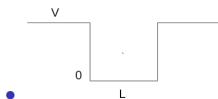
- $n = 5$ dokładność metody strzałów dla metody Numerowa



studnia skończona

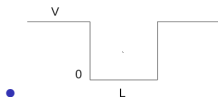
- $V(x) = V$ dla $|x| > L/2$; $V(x) = 0$ meV dla $|x| \leq L/2$
- $\Psi(x + \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Delta x^2\Psi(x) - \Psi(x - \Delta x) + 2\Psi(x)$

- skąd $\Psi(x)$, $\Psi(x - \Delta x)$?
- stany związane znikają daleko od potencjału, ale nie można wskazać konkretnego punktu - jak dla studni nieskończonej. Rachunki wymagają sprawdzenia rozmiaru pudła.



studnia skończona

- $V(x) = V$ dla $|x| > L/2$; $V(x) = 0$ meV dla $|x| \leq L/2$
- $\Psi(x + \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Delta x^2\Psi(x) - \Psi(x - \Delta x) + 2\Psi(x)$



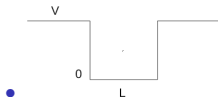
- skąd $\Psi(x)$, $\Psi(x - \Delta x)$?
- wykorzystać symetrię
- \hat{P} - operator parzystości, równanie własne operator $\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x) = \lambda\Psi(x)$, $\lambda = \pm 1$
- gdy $[H, \hat{P}] = [V(x), \hat{P}] = 0$ funkcje własne H są albo parzyste albo nieparzyste
 - 1 rozwiązania nieparzyste : $\Psi(0) = 0$, $\Psi(\Delta x) = a$
 - 2 rozwiązania parzyste : $\Psi(0) = b$, $\Psi(\Delta x) = b$, - zerowa pochodna w $x = 0$

skąd a i b ?

-
-
-
-

równanie Schrodingera w 1D metoda różnic skończonych

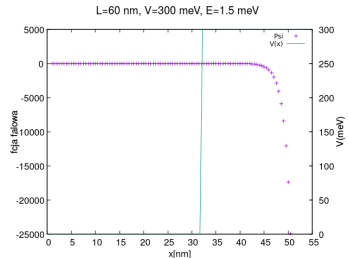
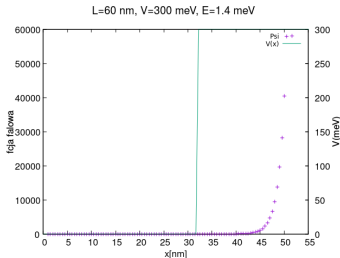
- $V(x) = V$ dla $|x| > L/2$; $V(x) = 0$ meV dla $|x| \leq L/2$
- $\Psi(x + \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Delta x^2\Psi(x) - \Psi(x - \Delta x) + 2\Psi(x)$



- skąd $\Psi(x)$, $\Psi(x - \Delta x)$?
- \hat{P} - operator parzystości, równanie własne operator $\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x) = \lambda P(x)$, $\lambda = \pm 1$
- gdy $[H, \hat{P}] = [V(x), \hat{P}] = 0$ funkcje własne H są albo parzyste albo nieparzyste
 - 1 rozwiązania nieparzyste : $\Psi(0) = 0$, $\Psi(\Delta x) = a$
 - 2 rozwiązania parzyste : $\Psi(0) = b$, $\Psi(\Delta x) = b$, - zerowa pochodna w $x = 0$
- a oraz b - dowolne, dlatego że funkcje własne określone z dokładnością do stałej multiplikatywnej
- funkcje falowe można unormować $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 = B \rightarrow \Psi' = \frac{\Psi}{\sqrt{B}}$, Ψ' - unormowana
- skąd E ? z warunku na lokalizację funkcji falowej (dyskretna część widma)
- ogólnie Ψ musi pozostawać skończona. dla stanów zlokalizowanych musi również zniknąć gdy $x \rightarrow \infty$.

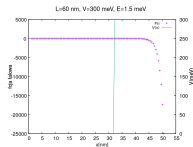
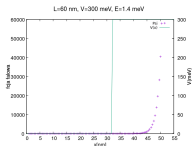
studnia potencjału

- $\Psi(x + \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Delta x^2\Psi(x) - \Psi(x - \Delta x) + 2\Psi(x)$
- jednostki atomowe : $a_b = 0.05292$ nm, energia : $2R_d = 27211.6$ meV, $m = 0.067$ (GaAs)
- $\Psi(x + \Delta x) = -2m(E - V(x))\Delta x^2\Psi(x) - \Psi(x - \Delta x) + 2\Psi(x)$
- stany parzyste $\Psi(0) = \Psi(\Delta x) = 1$, $\Delta x = 0.5$ nm (do programu)

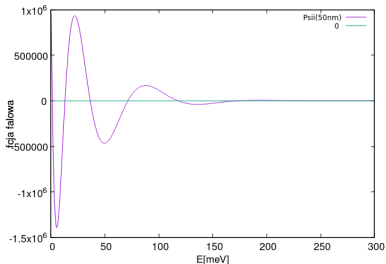


- zamiast znikania funkcji falowej daleko od studni mamy eksplozję
- rozwiązanie analityczne dla $x > L/2$: $c \exp(\kappa x) + d \exp(-\kappa x)$, z $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$. funkcje zlokalizowane, które można unormować wymagają aby $c = 0$, co możliwe tylko dla dyskretnej wartości energii.

studnia potencjału



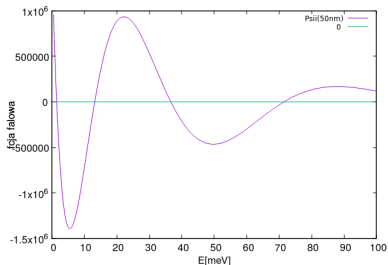
$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka stł



- $\Psi(x = 50\text{nm})$ jest ciągłą funkcją E . Miejsca zerowe odpowiadają energiom stanów związanych w studni.
- zadania: znaleźć je
- film shooting.gif

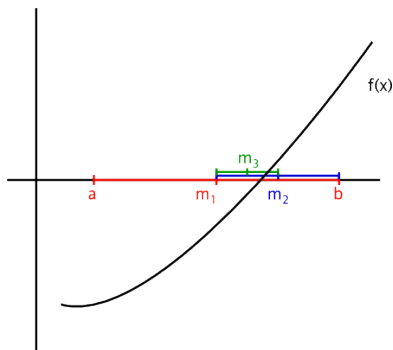
metoda strzałów / shooting method

$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka sti



- definicja funkcji $F(E) \equiv \Psi(x_\infty)(E)$
- problem znaleźć E dla których $F(E) = 0$
- problem rozwiązania równania nieliniowego

metoda bisekcji

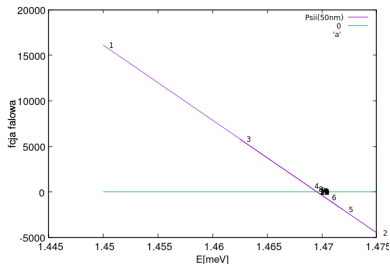


- rozwiązanie równania nieliniowego: najprostsza z metod – bisekcja
 - osaczyć zero : $f(b) > 0$ oraz $f(a) < 0$
 - $m = \frac{a+b}{2}$
 - albo $f(a)f(m) < 0$ wtedy $b := m$
 - albo $f(b)f(m) < 0$ wtedy $a := m$
 - jeśli $|a - b| >$ zadanej precyzji wyznaczenia zera, wracamy do 1)

- z każdym krokiem przedział, w którym poszukujemy zera (dokładność jego oszacowania) skraca się o połowę

bisekcja

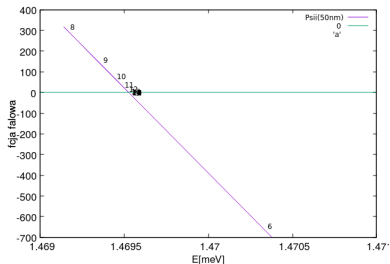
$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st.



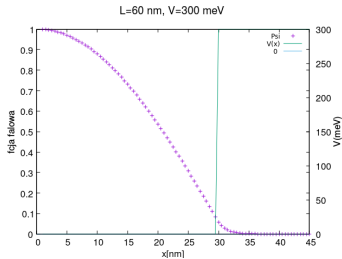
- kolejne wezwania funkcji

E	$\Psi(50nm)$	no
1.469531210	-4.0105	7
1.469140584	317.15	8
1.469335897	156.56	9
1.469433553	76.274	10
1.469482381	36.132	11
1.469506796	16.060	12
1.469519003	6.0249	13
1.469525106	1.0072	14
1.469528158	-1.5017	15
1.469526632	-0.24725	16
1.469525869	0.37996	17
1.469526250	0.66357E-01	18
1.469526441	-0.90447E-01	19

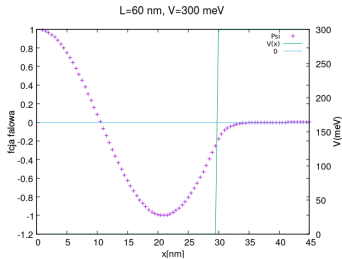
$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st.



stany własne

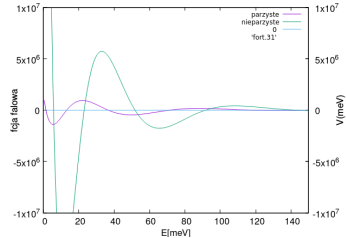


- stan podstawowy

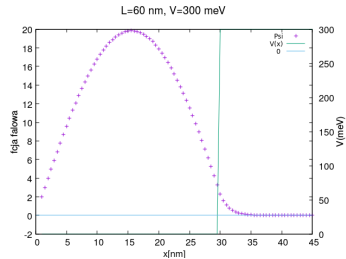


- najniższy parzysty stan wbudzony

60 nm, V=300 meV, funkcja falowa w odległości 50 nm od środka studni

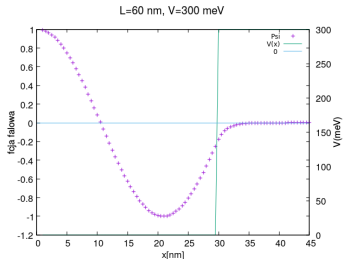


- parzyste i nieparzyste zera - naprzemiennie



- najniższy stan nieparzysty

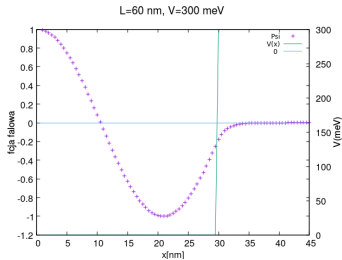
stany własne



- najniższy parzysty stan wbudzony

- zwróćmy uwagę na zmianę znaku drugiej pochodnej na skoku
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = (E - V(x))\psi$

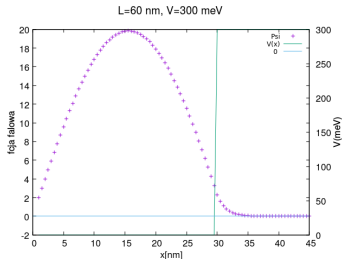
stany własne



- najniższy parzysty stan wbudzony

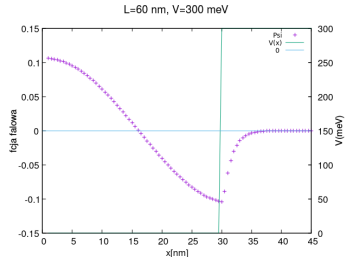
- dobry moment by przypomnieć formę rozwiązań analitycznych dla potencjału skończonego
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = (E - V(x)) \Psi$
- po lewej $E > V = 0$ po prawej $E < V = 300$
- w studni dla parzystego: $\Psi = A \cos(kx)$,
 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
- poza studnią z prawej strony:
 $\Psi = B \exp(-\kappa x)$, $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$

warunki brzegowe, studnia, przebiegi



- najniższy stan nieparzysty

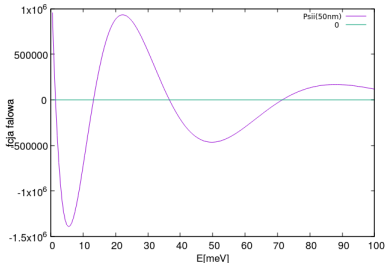
- druga pochodna nie jest ciągła
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = [E - V(x)] \Psi$



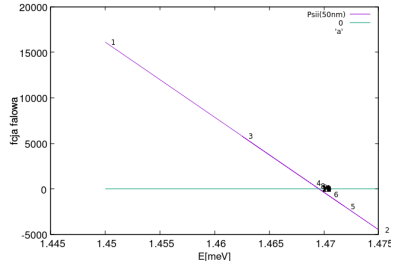
- pierwsza pochodna (iloraz różnicowy)

warunki brzegowe, studnia, przebiegi

$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st

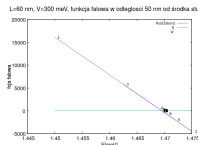
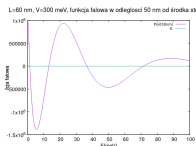


$L=60$ nm, $V=300$ meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st



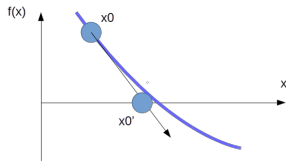
- Każda funkcja gładka w małym przedziale (w dużym zoomie) zachowuje się jak funkcja liniowa.
- Możliwość przyspieszenia rachunków z wykorzystaniem linearyzacji funkcji nieliniowej - metoda Newtona-Raphsona

metoda Newtona-Raphsona (stycznych, Newtona)



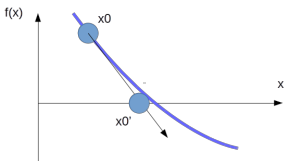
- rozwinięcie w szereg Taylora $f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x)|_{x_0} + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(x)|_{x_0} + \dots$
- szukamy $f(x) = 0$, x_0 to okolice zera $f(x)$, jeśli jesteśmy blisko $(x - x_0)^2$ - zaniedbywalne w porównaniu z wyrazem liniowym $(x - x_0)$
- rozwinięcie w szereg Taylora $0 = f(x) \simeq f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$
- liczymy $0 = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) \rightarrow x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- w przeciwieństwie do metody bisekcji wykorzystuje nie tylko znak funkcji, lecz jej wartość oraz pochodną (wysokość nad osią i nachylenie wykresu)

metoda Newtona-Raphsona



- metoda N-R sprowadza się do linearyzacji funkcji i przewidzenia, gdzie liniowa funkcja przecnie oś x
- jesteśmy w punkcie x_0 - prowadzimy prostą, która przechodzi przez punkt $(x_0, f(x_0))$ oraz ma nachylenie dane przez $f'(x_0)$
- równanie prostej : $F(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$.
- szukamy jej zera: dostajemy przepis jak poprzednio:
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- uwaga: dla funkcji liniowej procedura uzyskuje dokładny wynik w jednej iteracji (tempo zbieżności bisekcji w ogóle nie zależy od zachowania $f(x)$ w okolicach zera).

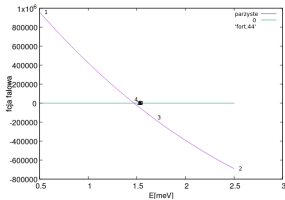
metoda Newtona-Raphsona



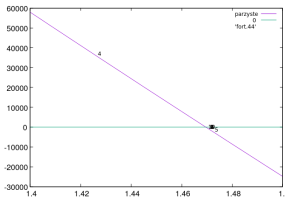
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- dla naszego problemu $E_{n+1} = E_n - \frac{\Psi(x_\infty; E_n)}{\frac{\partial \Psi(x_\infty; E)}{\partial E} |_{E_n}}$ (*)
- nie mamy analitycznego wyrażenia na mianownik, ale możemy go przybliżyć przez iloraz różnicowy np.
- $\frac{\partial \Psi(x_\infty; E)}{\partial E} |_{E_n} \simeq \frac{\Psi(x_\infty, E_n) - \Psi(x_\infty, E_{n-1})}{E_n - E_{n-1}}$
- zobaczymy: ze wzoru (*) wynika, że przybliżenie mianownika nie może zmienić punktu zbieżności iteracji E_∞ , dla którego musi zniknąć licznik ułamka

metoda Newtona-Raphsona

L=60 nm, V=300 meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st



L=60 nm, V=300 meV, funkcja falowa w odlegosci 50 nm od środka st



- $E_{n+1} = E_n - \frac{\Psi(x_\infty; E_n)}{\frac{\partial \Psi(x_\infty; E)}{\partial E} |_{E_n}} (*)$

- kolejne iteracje

E	$\Psi(50nm)$	no
0.500	957476.8	1
2.50	-691046.8	2
1.66	-152145.9	3
1.424	36988.0	4
1.471	-1383.42	5
1.4695407	-11.85	6
1.46952632	3.85E-003	7
1.469526330	1.82E-008	8

- zagrożenia dla iteracji: (1) start daleko od zera, gdzie np. pochodna znika
- (2) bardzo blisko zera mamy symbol nieoznaczony 0/0 zamiast pochodnej.
- zaradzić (1) - zaczynać od bisekcji (2) nie liczyć za dokładnie

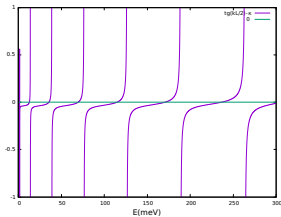
- $\frac{\partial \Psi(x_\infty; E)}{\partial E} |_{E_n} \approx \frac{\Psi(x_\infty; E_n) - \Psi(x_\infty; E_{n-1})}{E_n - E_{n-1}}$

studnia skończona, rozwiązanie dokładne

- $V(x) = 0$ dla $x \in (-L/2, L/2)$, $V(x) = V$ dla $x > L/2$
- $E < V$ $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$; $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$;
- stany parzyste:
 - | | | |
|---------------------------|-------------------|---------------------|
| $x < -L/2$ | $ x < L/2$ | $x > L/2$ |
| $\Psi = A \exp(\kappa x)$ | $\Psi = \cos(kx)$ | $A \exp(-\kappa x)$ |
 - stany nieparzyste:
 - | | | |
|----------------------------|-------------------|---------------------|
| $x < -L/2$ | $ x < L/2$ | $x > L/2$ |
| $\Psi = -A \exp(\kappa x)$ | $\Psi = \sin(kx)$ | $A \exp(-\kappa x)$ |
 - parzyste:
 - ciągłość funkcji: $\cos(kL/2) = A \exp(-\kappa L/2)$
 - ciągłość pochodnej: $-k \sin(kL/2) = -\kappa A \exp(-\kappa L/2)$
 - $k \operatorname{tg}(kL/2) - \kappa = 0$

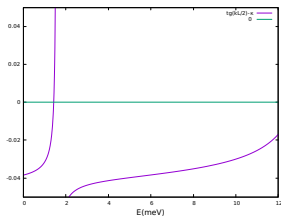
studnia skończona, rozwiązanie dokładne

- parzyste ($L = 60 \text{ nm}$, $V = 300 \text{ meV}$) :
- $k \operatorname{tg}(kL/2) - \kappa = 0$



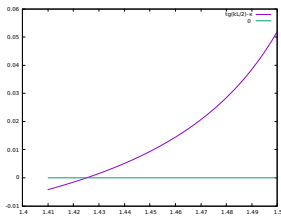
studnia skończona, rozwiązanie dokładne

- parzyste:
- $k \operatorname{tg}(kL/2) - \kappa = 0$



studnia skończona, rozwiązanie dokładne

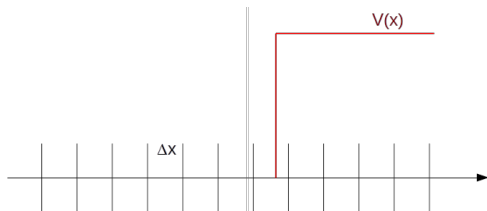
- parzyste ($L = 60$ nm, $V = 300$ meV) :
- $k \operatorname{tg}(kL/2) - \kappa = 0$



- miejsce zerowe (stan podstawowy): $E = 1.42521$ meV
- różnica względem rachunku metodą różnic skończonych $E = 1.46952$ meV
- efekt: (1) skończonego Δx
- (2) problem opisu studni prostokątnej na siatce różnicowej

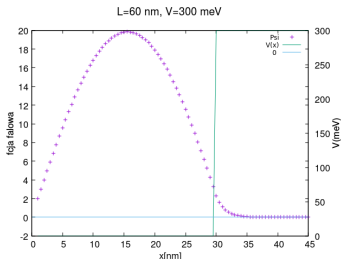
studnia skończona, rozwiązanie dokładne

- (2) problem opisu studni prostokątnej na siatce różnicowej



studnia skończona, rozwiązanie dokładne

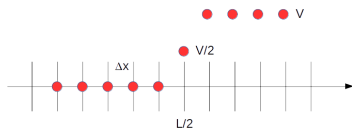
- L musi być zgrane z Δx
- $\Delta x = L/n$, gdzie n - integer
- rachunek na połowie siatki (stan parzysty)
- $L = 60$ nm
- $\Delta x = L/120$, 120 oczek siatki dla $x > 0$, pudło do 120 nm,
- dla $x \geq L/2$ (60 oczko siatki) wstawiamy $V = 300$ meV



- wynik: 1.4695 meV (zamiast 1.4252 meV)

studnia skończona, rozwiązanie dokładne

- rozwiązanie na siatce: $V(x) = \begin{cases} V; & |x| > L/2 \\ V/2; & |x| = L/2 \\ 0; & |x| < L/2 \end{cases}$



- wynik: 1.4501 meV (zamiast 1.4252 meV)

metoda iteracji w czasie urojonym

- metoda strzałów jako metoda do rozwiązywania równania własnego H jest ograniczona w swojej stosowalności do problemów jednowymiarowych
- do dowolnej liczby wymiarów stosować można iterację w czasie urojonym
- równanie Schrodingera $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ (*)
- równanie własne operatora energii $H\psi_n = E_n\psi_n$
- ewolucja w czasie stanu własnego $\Psi_n(x, t) = \exp(-i\frac{E_n t}{\hbar})\psi_n(x, t = 0)$

metoda iteracji w czasie

- zaczynamy od czasu rzeczywistego
- równanie Schroedingera $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ (*)
- równanie własne operatora energii $H\psi_n = E_n\psi_n$
- ewolucja w czasie stanu własnego $\Psi_n(x, t) = \exp(-i\frac{E_n t}{\hbar})\psi_n(x)$
- baza fcji własnych H jest zupełna i ortonormalna,
- zupełna: każdą funkcję ciągłą z pochodną i całkowlaną z kwadratem potrafimy rozwinąć:
$$f(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$
- ortonormalna: $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_a^b \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{mn}$
- ponieważ zupełna: dla dowolnego warunku początkowego $\Psi(x, t = 0)$ znajdziemy takie c_m , że $\Psi(x, t = 0) = \sum_m c_m \psi_m(x)$
- ponieważ ortonormalna: $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t = 0) \psi_n^*(x) dx$ (dlaczego?)
- r. Schroedingera jest liniowe, więc: $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-i\frac{E_n t}{\hbar})$

metoda iteracji w czasie urojonym

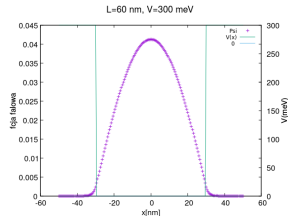
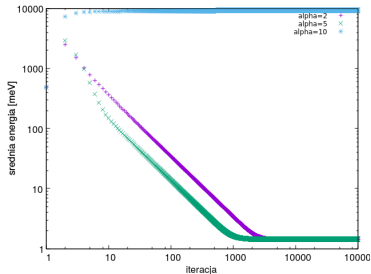
- zaczynamy od czasu rzeczywistego
- równanie Schroedingera $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ (*)
- równanie własne operatora energii $H\psi_n = E_n\psi_n$
- ewolucja w czasie stanu własnego $\Psi_n(x, t) = \exp(-i\frac{E_n t}{\hbar})\psi_n(x, t = 0)$
- r. Schroedingera jest liniowe, a baza fcji własnych jest zupełna i ortonormalna,
- $\Psi(x, t = 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$
- $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t = 0) \psi_n^*(x) dx$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-i\frac{E_n t}{\hbar})$
- czas urojony $t = -i\tau$ (**) (tzw. rotacja Wicka)
- $\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-\frac{E_n \tau}{\hbar})$
- jeśli poczekamy odpowiednio długo, $\Psi(x, \tau) \rightarrow c_1 \exp(-\frac{E_1 \tau}{\hbar})\psi_1(x) \rightarrow C(\tau)\psi_1(x)$, gdzie E_1 - energia stanu podstawowego

metoda iteracji w czasie urojonym

- równanie Schroedingera $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ (*)
- równanie własne operatora energii $H\psi_n = E_n\psi_n$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar})$
- czas urojony $t = -i\tau$ (**)
- $\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-\frac{E_n \tau}{\hbar})$
- w miarę upływu urojonego czasu τ z funkcji Ψ usuwane stany o wysokiej energii
- po pewnym czasie $\Psi(x, \tau) \rightarrow C(\tau)\psi_1(x)$
- w praktyce - poszukujemy stanów ψ_n
- wstawiamy (**) do (*)
- $-\hbar \frac{d\Psi}{d\tau} = H\Psi$
- iloraz różnicowy pochodnej $\frac{\Psi(\tau+d\tau) - \Psi(\tau)}{d\tau} = -\frac{H\Psi(\tau)}{\hbar}$
- $\Psi(\tau + d\tau) = \Psi(\tau) - \frac{d\tau}{\hbar} H\Psi(\tau)$, nazwiemy $d\tau/\hbar = \alpha$
- $\Psi(\tau + d\tau) = \Psi(\tau) - \alpha H\Psi(\tau)$
- film multigrid.gif

metoda iteracji w czasie urojonym

- $\Psi(\tau + d\tau) = \Psi(\tau) - \alpha H\Psi(\tau)$
- $\Psi(x, \tau + d\tau) = \Psi(x, \tau) - \alpha \left[V(x)\Psi(x, \tau) - \frac{\hbar^2}{2mdx^2} (\Psi(x - dx, \tau) + \Psi(x + dx, \tau) - 2\Psi(x, \tau)) \right]$
- $\Psi(\tau + d\tau) := \Psi(\tau + d\tau) / \langle \Psi(\tau + d\tau) | \Psi(\tau + d\tau) \rangle$
- $\langle E \rangle = \langle \Psi | H\Psi \rangle$
- warunki brzegowe: $\Psi(\pm x_\infty) = 0$



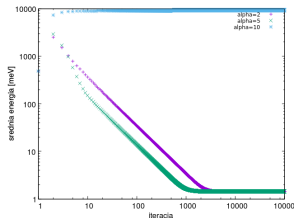
- zbieżność : start od funkcji falowej zlokalizowanej w całości w środkowym punkcie siatki

metoda iteracji w czasie urojonym

Filmy

- : zbieżność od starty d 'delta' dla $\alpha = 5$ [start-od-delta.gif]
- : zbieżność od bardziej skomplikowanej funkcji falowej ($\sin(x) + \cos(3 * x)$) dla $\alpha = 5$ [strange-start.gif]
- : $\alpha = 10$ - oscylacja [od-delta-tau-10.gif]
- jeśli usunąć normalizację : mamy albo zanik funkcji falowej, albo eksplozję
- stabilność iteracji w czasie - dla dowolnego schematu liniowego rozwiązywania równania cząstkowego – można zbadać analizą von Neumanna

optymalne α



- dla małych parametrów α zbieżność przyspiesza gdy parametr rośnie
- aż do wartości krytycznej α przy której energia nie tylko eksploduje, co osiąga wartość maksymalną dopuszczoną dla rozwiązań normalizowalnych na siatce
- warto znać wartość krytyczną

analiza von Neumanna

- $\Psi(x, \tau + d\tau) = \Psi(x, \tau) - \alpha \left[V(x)\Psi(x, \tau) - \frac{\hbar^2}{2mdx^2} (\Psi(x - \Delta x, \tau) + \Psi(x + \Delta x, \tau) - 2\Psi(x, \tau)) \right]$
- $\Psi(x, \tau + d\tau) = \Psi(x, \tau) + \alpha \frac{\hbar^2}{2mdx^2} [(\Psi(x - \Delta x, \tau) + \Psi(x + \Delta x, \tau) - 2\Psi(x, \tau))]$
- zanedbujemy V , usuwamy normalizację z iteracji
- filmy bez normalizacji i potencjału dla $\alpha = 5.7$ oraz $\alpha = 6.1$.
- analiza von Neumanna dla $x_j = j\Delta x$
- $\Psi(x_j, \tau) = \sum_k A_k^\tau \exp(ikj\Delta x)$
- $\Psi(x_j, \tau + d\tau) = \sum_k A_k^{\tau+d\tau} \exp(ikj\Delta x)$
- twierdzenie Parsevala - dla dyskretnej transformaty Fouriera : norma wektora Ψ_n oraz A_k są proporcjonalne, więc Ψ eksploduje wtedy i tylko wtedy gdy eksploduje A_k
- analiza eksplozji w przestrzeni wektora falowego bardzo prosta
- podstawiamy wyrażenia do schematu różnicowego, wykorzystujemy niezależność liniową fal płaskich $\exp(ikx)$ - opuszczając sumowanie po k , dzielimy przez $\exp(ikj\Delta x)$ dostajemy:
- $A_k^{\tau+d\tau} = A_k^\tau (1 + \beta (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2))$
- $A_k^{\tau+d\tau} = M_k A_k^\tau$, gdzie $M_k = (1 + \beta (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2))$ - współczynnik wzmocnienia
- przy $\beta = \alpha \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$

analiza von Neumanna

- $\beta = \alpha \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$
- $M_k = (1 + \beta (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2))$ - współczynnik wzmocnienia
- $\forall_k |M_k| \leq 1$ czyli $-1 \leq 1 + 2\beta(\cos(k\Delta x) - 1) \leq 1$
- $-2 \leq 2\beta(\cos(k\Delta x) - 1) \leq 0$ (prawa zawsze spełniona)
- $1 \geq \beta(1 - \cos(k\Delta x))$ wyrażenie w nawiasie w najgorszym razie równe 2
- $1 \geq 2\beta \rightarrow \beta \leq \frac{1}{2}$
- $\alpha \leq \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2}$
- w jednostkach atomowych przy $\Delta x = 0.5 \text{ nm} \rightarrow (0.5 / .05292)$, $m = 0.067$ (GaAs), $\hbar = 1$
- ograniczenie $\alpha \leq 5.98$

metoda czasu urojonego cd.

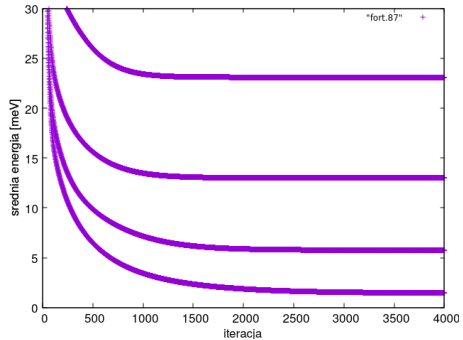
- Potrafimy prowadzić iterację w czasie urojonym tak, że funkcja falowa osiąga minimalną możliwą wartość oczekiwaną energii, równej energii stanu podstawowego
- (*) $\Psi(\tau + d\tau) = \Psi(\tau) - \alpha H\Psi(\tau)$
- A stany wzbudzone ?
- Mechanika kwantowa: stany stacjonarne to stany własne operatora hermitowskiego
- stany własne operatora hermitowskiego tworzą bazę ortogonalną,
- tzn. dla $H\psi_m = E_m\psi_m$ mamy $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{m,n}$
- $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int_a^b dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)$ - iloczyn skalarny w przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem
- dla stanów wzbudzonych: iteracja z ortonormalizacją: po ustaleniu $N - 1$ funkcji własnych prowadzimy iterację (*) dla stanu ψ_N z dodatkową ortonormalizacją do $N - 1$ wcześniej wyznaczonych stanów
- w rozwinięciu: $\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-\frac{E_n \tau}{\hbar})$
- ortonormalizacja usuwa c_n dla $n = 1, 2, \dots, N - 1$, tak aby uzyskać zbieżność do E_n

metoda czasu urojonego cd.

- iteracja z ortonormalizacją
- (1) liczymy $\Psi_N(\tau + d\tau) = \Psi_N(\tau) - \alpha H \Psi_N(\tau)$
- (2) ortonormalizujemy,
 - pętla po dla $n = 1, \dots, N - 1$
 - (2a) liczymy $c_n = \langle \Psi_n | \Psi_N \rangle$
 - (2b) odcinamy przyczynki od niższych stanów własnych $\Psi'_N := \Psi_N - \sum_{n=1}^{N-1} c_n \Psi_n$,
dzięki czemu $\langle \Psi'_N | \Psi_n \rangle = 0$ dla $n < N$
 - (2c) $\Psi_N = \Psi'_N$
- (3) normalizujemy Ψ_N , wracamy do (1), chyba że osiągnęliśmy zbieżność.

metoda czasu urojonego: wyniki

- iteracja z ortonormalizacją
- (1) liczymy $\Psi_N(\tau + d\tau) = \Psi_N(\tau) - \alpha H \Psi_N(\tau)$
- (2)
 - (2a) liczymy $c_n = \langle \Psi_n | \Psi_N \rangle$ dla $n = 1, \dots, N-1$
 - (2b) $\Psi_N := \Psi_N - \sum_{n=1}^{N-1} c_n \Psi_n$
- (3) normalizujemy Ψ_N , wracamy do (1), chyba że osiągnęliśmy zbieżność.

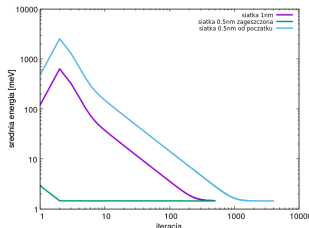


- filmy: iteracja do drugiego i trzeciego stanu, zwrócić uwagę na utrzymywaną w czasie iteracji ortogonalność do wcześniej ustalonych stanów

strategia iteracji

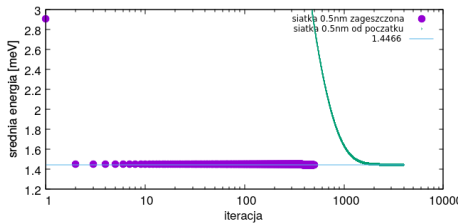
- z analizy von Neumanna krytyczny parametr iteracji: $\alpha \leq \frac{m\Delta x^2}{h^2}$
- im drobniejsza siatka tym wolniejsza zbieżność
- widzieliśmy, że doprowadzenie uzbieżnienia do końca jest stosunkowo powolne: bardzo małe poprawki do gładkiego rozwiązania (widać na filmach i na E od numeru iteracji)
- gładką część rozwiązania można oszacować na rzadszej siatce i to jest słuszna koncepcja bo: (1) iteracja na mniejszej liczbie punktów jest tańsza, (2) a α można radykalnie zwiększyć dla większego Δx
- metody wielosiatkowe (multigrid) znane najlepiej dla iteracyjnych metod rozwiązywania cząstkowych równań eliptycznych

metoda wielosiatkowa



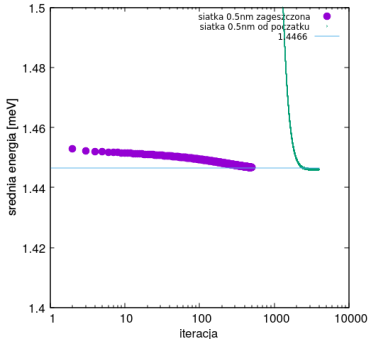
- z von Neumanna: $\alpha \leq \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2}$
- w programie, który wygenerował te wyniki $\alpha = 0.8 \frac{m\Delta x^2}{\hbar^2}$
- start od delty w siatce $2\Delta x = 1$ nm (fiolet)
- po uzbieźnieniu - przepisanie na siatkę $\Delta x = 0.5$ nm - w brakujących punktach średnia z sąsiadów
- znacznie mniej iteracji na siatce gęstej

metoda wielosiatkowa



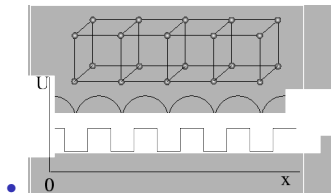
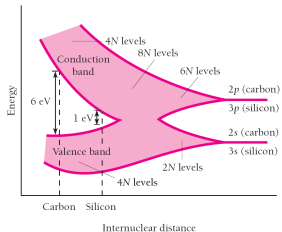
-
- powiększenie

metoda wielosiatkowa



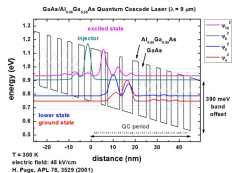
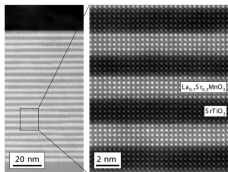
- o rząd wielkości mniej iteracji na gęstszej siatce potrzeba
- możliwe więcej niż 2 poziomy siatek
- w 1 wymiarze koszt iteracji jest rzędu N , przy siatce $N \times N$ w 2D rzędu N^2
- metody wielosiatkowe umożliwiają rachunki rozsądnej dokładności dla realnych problemów

pasma w kryształach



- 1 kryształ jako układ o periodycznym potencjale dla elektronów poziomy atomowe przechodzą w pasma
- 2 w każdym pasmie tyle poziomów, ile atomów w kryształ
- 3 między pasmami przerwy energetyczne

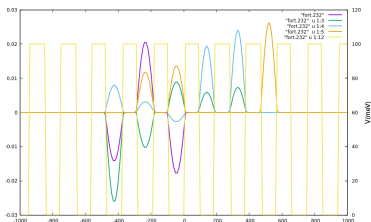
szuczny kryształ



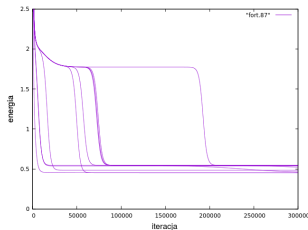
- potencjał dla elektronów z pasma przewodnictwa
- w GaAs / AlGaAs - laser kaskadowy

1D czas urojony ponownie

- sztuczny kryształ



- wielokrotna studnia kwantowa, supersieć



- iteracja w czasie urojonym: bardzo powolna - funkcja z trudem w iteracji przechodzi przez bariery
- cdn

- Metoda standardowa do rozwiązywania problemu własnego: diagonalizacja Hamiltonianu
- EISPACK, LAPACK, ARPACK, FEAST, etc..

diagonalizacja Hamiltonianu na siatce

- $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ (równanie własne operatora energii)
- $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ (zakładamy, że niezależny od czasu i problem 1D)
- algebraiczne równanie własne
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x-\Delta x) + \Psi(x+\Delta x) - 2\Psi(x)}{\Delta x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$
- przy numeracji $\Psi(x_n) = \Psi_n$ oraz $x_n = n\Delta x$
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{n-1} - 2\Psi_n + \Psi_{n+1}}{\Delta x^2} + V_n\Psi_n = E\Psi_n$
- wersja macierzowa

- $$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1(N-1)} & h_{1N} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2(N-1)} & h_{2N} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3(N-1)} & h_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ h_{N1} & h_{N2} & h_{N3} & \dots & h_{N(N-1)} & h_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \dots \\ \Psi_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \dots \\ \Psi_N \end{pmatrix}$$

- weźmy drugi wiersz $n = 2$
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_1 - 2\Psi_2 + \Psi_3}{\Delta x^2} + V_2\Psi_2 = E\Psi_2$
- $h_{21} = h_{23} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$
- $h_{22} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_2$

diagonalizacja Hamiltonianu na siatce

- wersja macierzowa

$$E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_1 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_2 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} =$$

- drugi wiersz $n = 2$

- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_1 - 2\psi_2 + \psi_3}{\Delta x^2} + V_2 \psi_2 = E \psi_2$
- $h_{21} = h_{23} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$
- $h_{22} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_2$

diagonalizacja Hamiltonianu na siatce

- wersja macierzowa

$$E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_1 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_2 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} =$$

- pierwszy wiersz $n = 1$
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2}{\Delta x^2} + V_1 \psi_1 = E \psi_1$
- $h_{13} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$
- $h_{11} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_1$
- brakuje w macierzy ψ_0 – czyli $\psi_0 = 0$ - warunek znikania funkcji falowej na brzegu wpisany w formę macierzy,
- podobnie $\psi_{N+1} = 0$
- rozwiązań - tyle ile punktów na siatce

diagonalizacja Hamiltonianu na siatce

- wersja macierzowa

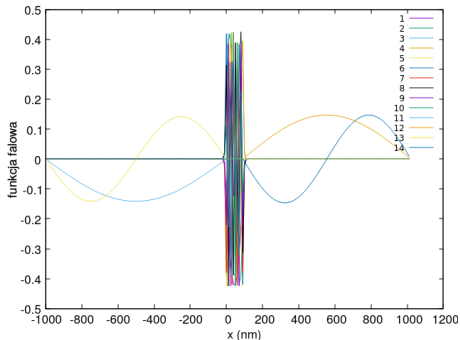
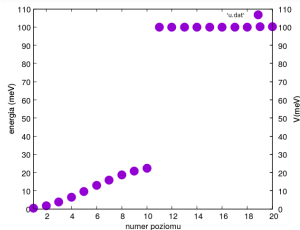
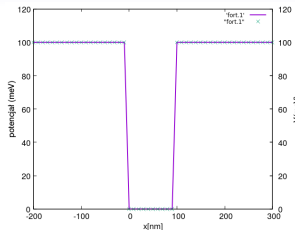
$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_1 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_2 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \dots \\ \Psi_N \end{pmatrix}$$

- macierz rzadka: trójprzekątniowa, w 2D, 3D - pięć i siedem przekątnych
- o wydajności diagonalizacji decyduje stosowana biblioteka numeryczna
- dla macierzy rzadkich procedury iteracyjne (ARPACK, FEAST), które wymagają podania wyniku mnożenia wektora przez macierz. Całej macierzy - z mnóstwem zer - nie przechowuje się w pamięci.
- Dla 1D - złożoność nie jest problemem, ogólne biblioteki (LAPACK, nawet Numerical Recipes) wystarczą

wiązanie

- film : wiazanie.gif
- poza studnią wraz z wiązaniem zmienia się funkcja falowa z trygonometrycznej na eksponencjalną
- zasięg penetracji - nieskończony tuż pod progiem wiązania
- $H\psi = E\psi$, dla $V < E$: $\exp(\pm ikx)$ gdzie $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$
- $H\psi = E\psi$, dla $V > E$: $\exp(\pm \kappa x)$ gdzie $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}$

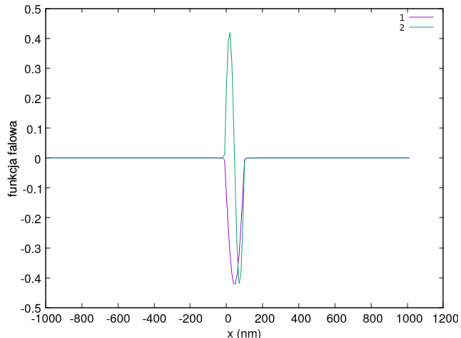
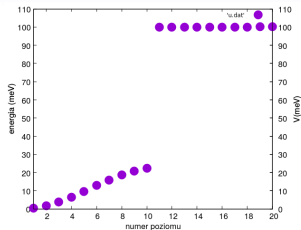
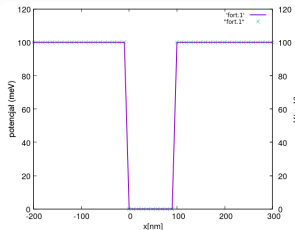
- wyniki: studnia potencjału



mamy 10 poziomów o energii poniżej bariery (progu continuum)

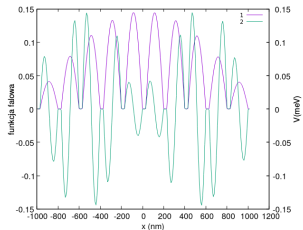
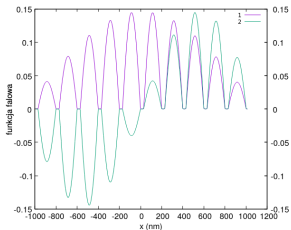
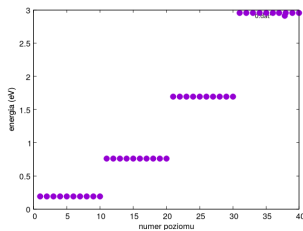
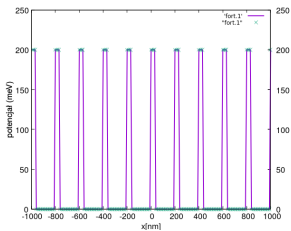
- widzimy 10 stanów zlokalizowanych w studni oraz 4 - rozmyte po obszarze studni - zobaczymy po lewej i prawej jej stronie

- studnia potencjału



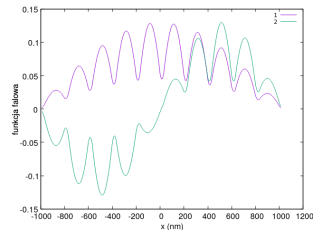
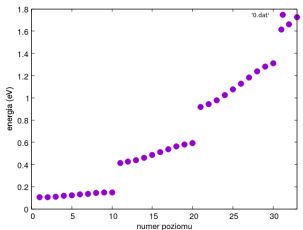
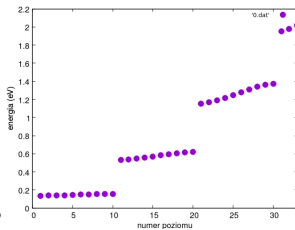
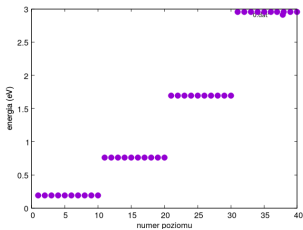
- funkcje falowe dwóch stanów o najmniejszej energii

szuczny kryształ



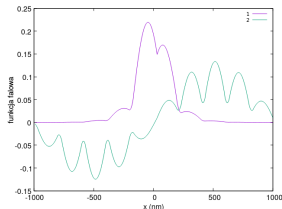
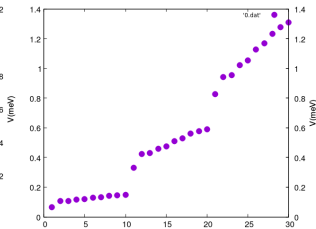
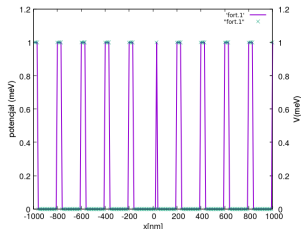
- po lewej 2 najniższe poziomy, po prawej najniższe poziomy z 1-szego i drugiego pasma

szuczny kryształ



- $v=200, 2, 1$, po prawej na dole 2 najniższe poziomy z 1-szego pasma dla $v=1$ meV

szuczny kryształ



- "defekt" - domieszka w kryształ, stan podstawowy zlokalizowany, w "przerwie", następnym (2-gi z kolei) zdelocalizowany po "kryształ"