

2b. Tillämpningar på programmet numerisk lösning

Här följer 3 förslag på fysikaliska tillämpningar. Diskutera med handledaren innan ni väljer.

1 Dubbelbrunnen.

Välj en dubbelbrunn med lämpliga värden på bredd och djup. Jämför energivärdena med enkelbrunnen. Presentera både lösningsmetoden och resultatet i lämplig grafisk form.

Utöka gärna till flera kopplade brunnar – bandstruktur!

2 Harmonisk oscillator

I fysiken är en kvadratisk potential som kallas för harmonisk oscillator vanlig. Tex kan man modellera molekyelvibrationer med en sådan potential. Potentialen skrivs konventionellt på följande sätt

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

Beräkna de 10 lägsta energierna i denna potential.

2a Mer realistisk vibrationspotential för en molekyl

För att få en mer realistisk potential kan man ”hugga av” potentialen dvs man sätter potentialen = 0 för stora x-värden. Använd denna modell för att modellera molekyelvibrationer. Ännu bättre är att använda Lennard–Jones-potentialen (https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential.)

2b Två-dimensionell harmonisk oscillator

Ett annat alternativ på ett utökat projekt är att modellera den harmoniska oscillatoren (eller en annan potential) i två dimensioner. Diskutera med handledaren innan ni ger er på detta.

3 Potentialbrunn med ”mjuka” former

Istället för en vanlig potentialbrunn kan man använda följande potential

$$V(x) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|x| - b}{\delta}\right)}.$$

Välj konstanten δ betydligt mindre än b och plotta potentialen.

Bestäm energinivåer och jämför med den vanliga, ändliga brunnen.

Detta projekt kan i mån av tid också göras i två dimensioner.