

Frist for innlevering: *Tirsdag 17. mars kl 17*

ØVING 7

Denne øvinga krev kjøring av Matlab-program, så ta med PC (om du ikkje vil bruke datasalen). Last også ned Matlab-programmet som ligg på heimesida. **Berre oppgåve 1 er obligatorisk.**

Oppgåve 1 Numerisk løysning av den tidsuavhengige Schrödingerlikninga

Innleiing

I denne oppgåva skal vi bruke ein numerisk metode til å finne energiar og eigenfunksjonar for bundne tilstandar i eit eindimensjonalt potensial $V(q)$.

Oppgåva skal styrke studentanes kompetanse innanfor numerikk og bruk av IKT. Vi bruker Matlab og programmet er lagt ut på heimesida.

Dimensjonslause variable

I numerisk arbeid bruker vi dimensjonslause variable. La oss sjå på den eindimensjonale harmoniske oscillatoren med Schrödingerlikninga

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right] \psi = E\psi, \quad (1)$$

som eit døme. Her veit vi at $\sqrt{\hbar/m\omega}$ har dimensjon lengde. Dette er også ei *karakteristisk* lengde for oscillatoren. Då er det naturleg å innføre

$$x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}$$

som dimensjonslaus koordinat. Ved å dividere (1) med $\hbar\omega$, finn vi at den tar forma

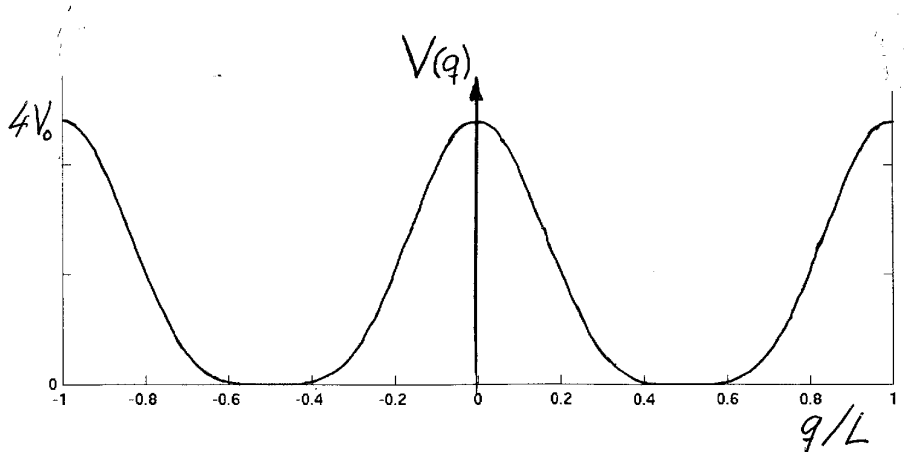
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi = \epsilon \psi. \quad (2)$$

a) Gjennomfør dette, dvs utlei (2) frå (1), og finn det dimensjonslause potensialet $v(x)$ uttrykt ved x . Finn og samanhengen mellom den dimensjonslause eigenverdien ϵ og energien E .

b) I denne oppgåva skal vi m.a studere eigenfunksjonar og spesielt energiar for eit litt spesielt potensial, som liknar på ein boks ved at det er uendeleg for $|q/L| > \frac{1}{2}n_L$. Det er imidlertid ikkje flatt i botnen mellom dei harde veggane, men på forma

$$V(q) = V_0 \left(1 + \cos \left[\frac{2\pi}{L} \left(q + \frac{1}{2}n_LL \right) \right] \right)^2 \quad \left(-\frac{1}{2}n_L < \frac{q}{L} < \frac{1}{2}n_L \right).$$

Dette potensialet er periodisk med periode L . Boksen inneheld n_L periodar, slik at lengda er n_LL . Figuren viser $V(q)$ for ein boks med $n_L = 2$ periodar:



Innfør den dimensjonsløse koordinaten $q/L = x$, og finn $v(x)$ (uttrykt ved x og n_L) og ϵ i dette tilfellet. [Merk at \hbar^2/mL^2 har dimensjon energi. For $m = m_e$ og $L = 2a_0$, t.d, er $\hbar^2/m_e L^2 = \frac{1}{2} \hbar^2/2m_e a_0^2 = \frac{1}{2} \cdot 13.6 \text{ eV}$.]

Diskretisering

Ved å Taylor-utvikle rundt x ,

$$\psi(x \pm s) = \psi(x) \pm s\psi'(x) + \frac{s^2}{2!} \psi''(x) \pm \frac{s^3}{3!} \psi'''(x) + \frac{s^4}{4!} \psi''''(x) + \dots,$$

ser vi at

$$\psi(x-s) - 2\psi(x) + \psi(x+s) = s^2 \psi''(x) + \frac{s^4}{12} \psi''''(x) + \dots \quad (3)$$

For små s kan vi altså uttrykke $\psi''(x)$ ved verdiane av ψ i punktet x og dei to nabopunkta $x \pm s$:

$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x-s) - 2\psi(x) + \psi(x+s)}{s^2}. \quad (4)$$

Vi har neglisjert ledd nr 2 (osb) på høgresida i (3) og må vi difor rekne med at den relative feilen i uttrykket (4) for ψ'' blir av orden s^2 . (Jf c) nedanfor.)

Vi vil nå prøve å løyse likning (2) numerisk, ved å diskretisere den dimensjonsløse variabelen x . Vi deler inn eit intervall $x_{\min} < x < x_{\max}$ i N like store intervaller, med lengde

$$s = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N}.$$

I programmet (sjå nedanfor) er dei diskrete x -verdiane

$$x_{\min}, x_{\min} + s, x_{\min} + 2s, \dots, x_{\max}$$

samla i eit array $x(1 : N + 1)$. Verdiane av ψ i desse punkta, som førebels er ukjende, kan vi tenke oss plassert i eit array $\psi(1 : N + 1)$, og (dei kjende) verdiane av potensialet $v(x)$ i dei same punkta plasserer vi i $V(1 : N + 1)$. Vi treng også ψ'' i desse punkta. Vi vel x_{\min} og x_{\max} slik at vi med god tilnærming kan sette $\psi(x_{\min} - s) = 0$ og $\psi(x_{\max} + s) = 0$. Då har vi med approksimasjonen (4)

$$\psi''(1) = s^{-2}[0 - 2\psi(1) + \psi(2)]$$

$$\begin{aligned}
\psi''(2) &= s^{-2}[\psi(1) - 2\psi(2) + \psi(3)] \\
&\vdots \\
\psi''(k) &= s^{-2}[\psi(k-1) - 2\psi(k) + \psi(k+1)] \\
&\vdots \\
\psi''(N+1) &= s^{-2}[\psi(N) - 2\psi(N+1) + 0].
\end{aligned} \tag{5}$$

Likning (2) gir $N+1$ likninger:

$$-\frac{1}{2}\psi''(i) + V(i)\psi(i) = \epsilon\psi(i); \quad i = 1, 2, \dots, N+1.$$

I disse likningane set vi nå inn fra (5). Med $e = -1/2s^2$ og

$$d(1:N+1) = V(1:N+1) + \frac{1}{s^2}$$

kan disse likningane skrivast på matriseform:

$$\begin{pmatrix} d_1 & e & & & \\ e & d_2 & e & & \\ & e & d_3 & e & \\ & & e & d_4 & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Her er alle elementa som ikkje er skrive opp i Hamilton-matrissa til venstre lik null. Denne såkalla tridiagonale matrissa kan diagonaliserast vha ei (modal) matrise S :

$$S^{-1}HS = D. \tag{7}$$

Elementa i den diagonale matrissa D er då eigenverdiane ϵ_n ($n = 1, \dots, N+1$) til Hamilton-matrissa H , altså energieigenverdiane i dimensjonslaus utgåve, jf (2). Søylene i transformasjonsmatrissa S er dei tilhøyrande energieigenfunksjonane, $\psi_n(1:N+1)$. Merk at dette systemet tilsvarer grensekrava

$$\psi(x_{\min} - s) = \psi(x_{\max} + s) = 0. \tag{8}$$

Dette er viktig m.a når vi skal behandle boks-potensialet nedenfor.

Vel først harmonisk oscillator-potensial, ved å fjerne eit kommentarteikn “%” i Matlab-programmet. Set $X_{\max} = 10$ og finn grunntilstandsenergien ved å rekne med N lik 640, 320, 160 og 80. Påvis at feilen i dei numeriske resultata er proporsjonal med s^2 , slik vi måtte vente ut fra (3) og (4).

Når programmet kjøyrast (t.d. for $N = 640$), kjem det ut m.a eit diagram som viser ϵ_n som funksjon av n . Korleis skal denne kurva oppføre seg teoretisk? (Jf spektret av eigenverdiar for ein harmoniske oscillator.) Kvifor er det eit ganske stort avvik mellom dei numeriske resultata og dei teoretiske, unntatt for relativt små n ? [Hint: Sjå på grensekravet i forhold til dei teoretiske klassiske vendepunkta. Kan du rekne med at metoden vil fungere med ein tilstand som har vendepunkt *utanfor* intervallet mellom x_{\min} og x_{\max} ? Det kan også vere en idé å gjenta utrekninga med $x_{\max} = 20$.]

d) For den harmoniske oscillatoren må x_{\max} (rimelegvis) veljast noko større enn avstanden til det klassiske vendepunktet for ein gjeven tilstand, for at tilstanden og den tilhøyrande eigenverdien skal kome ut nokonlunde nøyaktig. Vi skal nå prøve metoden på ein boks med lengde $n_L \cdot L$, slik at $V = 0$ for $-\frac{1}{2}n_L \cdot L < q < \frac{1}{2}n_L \cdot L$. Med $q/L = x$ svarer dette til $-\frac{1}{2}n_L < x < \frac{1}{2}n_L$ (slik at bokslengda er n_L).

Her må vi vere litt meir nøye med valet av x_{\min} og x_{\max} . Programmet vårt er basert på grensekravet $\psi(x_{\min} - s) = \psi(x_{\max} + s) = 0$. Desse må vi nå matche mot boks-kravet $\psi(\pm \frac{1}{2}n_L) = 0$. Vi må altså sette

$$x_{\min} - s = -\frac{1}{2}n_L \quad \text{og} \quad x_{\max} + s = \frac{1}{2}n_L.$$

Med $x_{\max} - x_{\min} = Ns$ impliserer dette at boksen er delt i $N + 2$ intervallar med lengde $s = n_L/(N + 2)$. Overtyd deg om at vi då må bruke

$$x_{\max} = -x_{\min} = \frac{n_L}{2} \frac{N}{N + 2}$$

for denne boksen med lengda $n_L \cdot L$.

Bruk dette og kjøyr programmet med boks-potensialet og med $N = 800$. Samanlikn resultatata for ϵ_n med dei teoretiske, som er

$$\epsilon_n = \frac{E_n}{\hbar^2/mL^2} = \frac{1}{2}\pi^2 n^2.$$

[Hint: For m.a å kunne samannlikne seinare bør du skrive ut, og notere, ϵ_n og $2\epsilon_n/\pi^2$ for $n=1,2,10$ og 20 .]

e) Vel nå potensial nummer 5 i programmet (forklart i b)), slik at potensialet inne i “boksen” er

$$v(x) = v_0 \left(1 + \cos \left[2\pi \left(x + \frac{1}{2}n_L \right) \right] \right)^2.$$

Prøv fyrst med $n_L = 1$, som svarer til éin periode. Vel v_0 lik 30. I den eine figuren som skrivast ut finn du $v(x)$ og dei ti lågaste eigenverdiane ϵ_n . Les ut dei klassiske vendepunkta for $n = 1$ og $n = 2$, og sjekk om dei to bølgefunksjonane ψ_1 og ψ_2 krummar slik dei skal. Skriv ned verdiane til ϵ_1 og ϵ_2 . Print også ut $2\epsilon_1/\pi^2$ og $2\epsilon_2/\pi^2$ og samanlikn med dei tilsvarende verdiane under d). Kvifor blir ϵ_1 og ϵ_2 større her enn i d)? Sjekk kor mykje ϵ_{10} og ϵ_{20} har auka frå d) til e), og samanlikn auken med gjennomsnittet av $v_0[1 + \cos(2\pi(x - n_L/2))]^2$, som er $3v_0/2$.

f) Prøv nå med $n_L = 2$ (dvs med dobbelt så stor vidde, slik at det blir plass til 2 periodar). Skriv ned dei fire lågaste eigenverdiane, og samanlikn med resultatata frå førre punkt. Ta ut eit diagram som viser dei tilsvarende eigenfunksjonane, merk av kva som er kva, og legg dette ved innleveringa. Korleis kan det ha seg at eigenverdiane her blir parvis nesten samannfallande, og i tillegg nesten er dei same som med éin periode?

Sett $v_0 = 15$ og $n_L = 5$, og skriv ned dei 11 lågaste eigenverdiane. Poenget her er at desse eigenverdiane samlar seg i “bånd”, med energigap imellom. Dette er trekk som er typiske for periodiske potensial, som ein t.d finn i eit metall. Meir om dette i faste stoffers

fysikk og i TFY4205 Kvantemekanikk II. Ta ut eit diagram som viser dei 5 fyrste eigenfunksjonane, og marker kva som er kva.

g) Dersom du lyst, kan du bruke programmet på eit potensial som du selv vel.

```
% matlab_program_ex9.m
% One-dimensional confining potential,
% solved through matrix diagonalization
% hbar = m = 1

close all; % removes plots from previous run

% Number of grid points: N+1
N = 500; % Number of steps between Xmin and Xmax
% if potential number 1 or 2 or 3:
Xmax = 10; Xmin = -Xmax; %% (symmetric range)

%% if potential number 6:
% Range (from zero to XL, potential infinite for x<0):
% XL = 10;
% Xmax = XL*(N+1.0)/(N+2.0); Xmin =XL/(N+2.0);

% If Potential number 4 or 5 (Box potential without or with modified bottom),
% choose amplitude of modification (v0); and number of periods (nL):
% v0 = 30; nL=1; Xmin=-nL/2.0*N/(N+2); Xmax=-Xmin;

% Step size:
dx = (Xmax - Xmin)/N;
% Position x is array with values Xmin, Xmin+dx, ... , Xmax:
x = (Xmin):dx:(Xmax);

% Choose type of potential by removing one commenting % sign:

% potential number 1: Harmonic oscillator:
% V = 0.5*x.^2;
% potential number 2: Symmetric double well:
% V = 0.01*x.^4-0.5*x.^2+6.25;
% V=x.^4;
% potential number 3: V-shaped potential:
% V = abs(x);
% potential number 4: Ordinary box (use nL=1 above):
% V=0.00*x;
%
% Potential number 5: Box potential with sinusoidal bottom;
% amplitude of the cosine is v0; number of periods of the cosine is nl:
%
```

```

% V = v0*(1+cos(2*pi*(x+nL/2.0))).^2;
%
% potential number 6: linear potential, infinite for x<0:
%   V = x;

% Diagonal elements
d = 1/dx^2+V;
% Off-diagonal elements
e = -1/(2*dx^2);
% Setting up the Hamiltonian matrix, first diagonal terms:
H = diag(d);
% Next, include off-diagonal elements:
H(2:(N+1),1:N) = diag(e*ones(1,N)) + H(2:(N+1),1:N);
H(1:N,2:N+1) = diag(e*ones(1,N)) + H(1:N,2:N+1);
% Diagonalizing the matrix solves the Schrödinger equation.
% The command [S,D] = eig(H) produces matrices of eigenvalues (D) and
% eigenvectors (S) of matrix H, so that H*S = S*D. Matrix D is the
% canonical form of H - a diagonal matrix with H's eigenvalues on
% the main diagonal. Matrix S is the modal matrix - its columns are
% the eigenvectors of H:
[S,D] = eig(H);
% We store the eigenvalues in the array "eigenvalues":
eigenvalues = diag(D);
% Plot wavefunction for lowest eigenvalue (n = 1):
% n = 1;
% plot(x,(S(:,n)')));
% Plot absolute square of wavefunction nr n:
% plot(x,(S(:,n)')).^2);
% To display several wavefunctions in one plot:
null=zeros(1,N+1);
figure;
plot(x,(S(:,1)')),x,(S(:,2)')),x,(S(:,3)')),x,(S(:,4)')),x,(S(:,5)')),x,null);
%% plot(x,(1000*S(:,1)')),x,(1000*S(:,2)')),x,(1000*S(:,3)')),x,(1000*S(:,4)')),
%% x,V-3*v0,x,null);
%%axis([-1 1 -3*v0 90]);
% print -dpng name1.png % creates png-file (for LINUX)
% To display several wavefunctions squared in one plot:
% plot(x,(S(:,1)')).^2,x,(S(:,2)')).^2,x,(S(:,3)')).^2,x,(S(:,4)')).^2);
% Plot the potential V(x) in a new figure:
% First make arrays for each of the eigenvalues:
e1=eigenvalues(1)*ones(1,N+1);
e2=eigenvalues(2)*ones(1,N+1);
e3=eigenvalues(3)*ones(1,N+1);
e4=eigenvalues(4)*ones(1,N+1);
e5=eigenvalues(5)*ones(1,N+1);
e6=eigenvalues(6)*ones(1,N+1);
e7=eigenvalues(7)*ones(1,N+1);

```

```

e8=eigenvalues(8)*ones(1,N+1);
e9=eigenvalues(9)*ones(1,N+1);
e10=eigenvalues(10)*ones(1,N+1);
horisontal=300*ones(1,N+1);

% figure; %plot potential alone
% plot(x,V);
% xlabel('x=q/L')
% ylabel('V/V_0')
% print -dpng name.png % creates png-file (for LINUX)

figure; % plot of v(x) and the first 10 eigenvalues:
% plot(x,V,x,horisontal);
plot(x,V,x,e1,x,e2,x,e3,x,e4,x,e5,x,e6,x,e7,x,e8,x,e9,x,e10);
%%print -dpng name2.png % creates png-file (for LINUX)

% Plot (all) the eigenvalues in a new figure:
figure;
plot(eigenvalues);

% print the first eleven eigenvalues and eigenvalue no 20:

for i=1:9
fprintf(' E%1d = %4.6f \n', i,eigenvalues(i));
end
fprintf(' E10 = %4.6f \n',eigenvalues(10));
fprintf(' E11 = %4.6f \n',eigenvalues(11));
fprintf(' E20 = %4.6f \n',eigenvalues(20));
% print eigenvalues* 2/pi^2, relevant for box:
fprintf('Eigenvalues relevant for box: \n ');
fprintf(' E1*2/pi^2 = %4.6f \n E2*2/pi^2 = %4.6f \n E10*2/pi^2 = %4.6f \n',eigenvalu

% xav=sum(x.*(S(:,1)').^2); % trapezoidal integration
% fprintf('\n xav = %4.6f',xav);

```

Oppgave 2 Numerisk løysing av den tidsuavhengige Schrödingerlikninga for partikkel i tyngdefelt

Denne oppgåva går ut på å finne energien og bølgefunksjonen for grunntilstanden til ein partikkel med masse M som bevegar seg i eit tyngdefelt, over eit “hardt gulv”:

$$V(z) = \begin{cases} \infty & \text{for } z < 0, \\ Mgz & \text{for } z > 0. \end{cases}$$

Her er g en tyngdeakselerasjon. Vi ser bort frå bevegelsen parallelt med gulvet, og reknar altså med eit endimensjonalt potensial. Med passende dimensjonslause variable (som vi kjem tilbake til) treng vi å løyse likning (2) i forrige oppgåve med

$$v(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0, \\ x & \text{for } x > 0. \end{cases}$$

Dette er potensial nr 6 i programmet ovanfor, der vi set $\psi = 0$ for $x = 0$ og for $x = XL$ (med ein passande valt XL), og set $X_{\min} = XL/(N+2)$ og $X_{\max} = XL(N+1)/(N+2)$ (slik at området $0 < x < XL$ delast i $N+2$ intervall).

Bruk programmet (med potensial nr 6) til å finne grunntilstandsløysinga $\psi_1(x)$ av likning (2) og den tilhøyrande ϵ -verdien ϵ_1 . Print ut $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_5(x)$ i eit diagram og $(\psi_1(x))^2$ i eit separat diagram, og legg desse ved.

b) Som du nå skjønner, vil partikkelen ikkje kunne ligge i ro på gulvet. Bølgefunksjonen ψ_1 og kvadratet av denne fortel jo at både potensiell og kinetisk energi er positive. Finn (på augemål) eit estimat av $\langle v \rangle = \langle x \rangle$.

c) For å finne ut kor store E , $\langle V \rangle$ og $\langle K \rangle$ er må vi finne samanhengen mellom dei dimensjonslause variablane ϵ , x og variablane E og z . Bruk uskarpheitsrelasjonen til å vise at forventningsverdien $\langle z \rangle$ for grunntilstanden må vere omlag $(\hbar^2/(M^2g))^{1/3}$. [Hint: Usikkerheiten Δz vil vere omlag $\langle z \rangle$. Videre er $\langle p_z \rangle = 0$ (som alltid for bundne tilstander), og $(\Delta p_z)^2 = \langle p_z^2 \rangle$ er omlag $2ME_1$, der E_1 er circa $Mg \langle z \rangle$. Merk at vi her ser litt stort på ein faktor 2 el. likn. Poenget er å finne ut korleis $\langle z \rangle$ skalerer med parametrane \hbar , M og g .]

d) Innfør

$$z = x \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3} \cdot f,$$

vel talfaktoren f slik at energieigenverdilikninga får forma (2) med $v(x) = x$, og finn med dette samanhengen mellom E_1 og ϵ_1 , og dermed grunntilstandsenergien E_1 . Kva blir ditt estimat for $\langle z \rangle$ for grunntilstanden?

e) Anta at partikkelen er eit elektron ($M = m_e$) og finn den karakteristiske lengda $(\hbar^2/m_e^2g)^{1/3}$ i eit tyngdefelt med $g = 10 \text{ m/s}^2$. Vi har $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ og $\hbar/m_e c = 0.3682 \cdot 10^{-12} \text{ m}$.

f) Finn $\langle x \rangle$ for grunntilstanden ved hjelp av Matlab-programmet, og bruk dette til å finne forholdet $\langle K \rangle / \langle V \rangle$ mellom forventningsverdiane av kinetisk og potensiell energi for denne tilstanden.

g) At $\langle z \rangle$ skalerer på den måten vi har funne ovanfor, kan også finnes vha såkalla dimensjonsanalyse: Sett

$$\langle z \rangle = \text{konst} \cdot M^\alpha g^\beta \hbar^\gamma,$$

og finn eksponentane α , β og γ ut fra kravet om at dimensjonen til $\langle z \rangle$, altså $[\langle z \rangle]$, skal vere meter. Hint: Dimensjonane til M , g og \hbar er

$$[M] = \text{kg} = \text{Ns}^2/\text{m}, \quad [g] = \text{m/s}^2, \quad [\hbar] = \text{Nms}.$$