

LABORATION I TEORETISK FYSIK SI1155 2018

Simulering av Schrödingerekvationen

I denna laboration ska vi köra python program som simulerar Schrödingerekvationen med två olika metoder, Verlet algoritmen och SPO-metoden (engelska: split operator method). Laborationen utförs enskilt eller i grupp om högst tre. Helst ska laborationen göras på egen laptop så att materialet blir en del av en verktygslåda som är tillgängligt för framtida behov. Om man inte har tillgång till egen laptop dator ska man se till att komma i en grupp med någon som har dator. Först kommer instruktion om hur man får igång python på sin egen dator, sedan beskrivs metoder, uppgifter och rapporteringen.

Enthought Python

OBS OBS Viktig förberedelse inför laborationen: ladda ner och försök få igång python/Canopy innan laborationen. Om många laddar ner under laborationstillfället blir nerladdningshastigheten väldigt långsam.

Proceduren för att få igång python och köra program är samma på Mac, Linux och Windows. I bästa fall går allt enkelt, men ibland krånglar det varpå någon inställning brukar behöva ändras (se nedan). Python behöver matematik- och grafikbibliotek för att bli användbart för simulering. Vi använder matplotlib. Om du inte redan har en fungerande pythonmiljö på din dator som klarar att köra de bifogade programmen så kan du ladda ner och använda programpaketet Enthought Canopy från webben. De bifogade programmen är för python 3 men man enkelt anpassas för python 2 genom att byta `print(x)` mot `print x`. Pythonprogram kan bekvämt editeras och köras i Canopymiljön. Skaffa gratis "academic license" samt ladda ner Canopy här: <https://www.enthought.com/products/canopy/academic/> Logga in (sign in) och ladda ner Canopy från Academic License sidan.

OBS: Om animering inte fungerar på skärmen när koden körs, byt "pylab backend" i "preferences" till "TK". Om det fortfarande inte fungerar, prova att välja övriga backends.

1 Stationära tillstånd med Verletmetoden

Den första metoden som vi ska använda är en standardmetod i fysiken som baseras på att stega fram lösningen med derivatorna approximerade som ändliga differ-

enser. Metoden kallas Verletmetoden och är en förbättrad variant av Eulers metod. Verlet ger mycket bättre resultat än Euler av skäl som diskuteras i kursen i beräkningsfysik. För tidsberoende Schrödingerekvationen kan Verletmetoden skrivas

$$\psi(x + \Delta x) = \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} (\Delta x)^2$$

$$\frac{d\psi(x + \Delta x)}{dx} = \frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x + \Delta x)}{dx^2} \right] \Delta x$$

Andraderivatorna beräknas mha Schrödingerekvationen,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2} \psi(x)$$

Felet är av ordning $(\Delta x)^2$.

För att hitta energiegentillstånden och deras egenvärden gör man så här. Gissa ett energiegenvärde E i intervallet $V_{\min} < E < V(\infty)$. Starta vid ett lämpligt x -värde där lösningen är känd, tex djupt inne i ett klassiskt förbjudet område där $\Psi \approx 0$ och använd startvärdena $\Psi(x) = 0, d\Psi(x)/dx = 1$. Iterera fram lösningen genom att stega i x -riktningen med Verletmetoden så att potentialen passeras. Kontrollera om $\Psi \rightarrow 0$ i det förbjudna området på andra sidan potentialen. Om Ψ i stället divergerar är värdet på E fel. Gör om med ett justerat värde på E så att en lösning som uppfyller $\Psi \rightarrow 0$ för stora x fås. I en oändlig potentiallåda sätter man $\Psi(x = 0) = 0, d\Psi(x = 0)/dx = 1$ och räknar fram lösningen och ser om $\Psi(a) = 0$.

Denna metod kallas ofta för "shooting". Man väljer det ena randvillkoret, stegar fram en lösning och kontrollerar om lösningen träffar det andra randvillkoret. Vid miss justerar man siktet och löser igen tills man får träff. Lösningen $\Psi(x)$ kommer inte att vara normerad, men det spelar ingen roll för värdet på E (varför?). Denna metod fungerar utmärkt för problem med bundna tillstånd och kan ofta enkelt ge egenvärden E med fem siffrors noggrannhet. I denna laboration ska en bunden elektron simuleras. Här ska en trekantspotential användas men metoden är generell och fungerar strålande för alla val av potential. Metoden kan med fördel användas för att studera viktiga tillämpningar som elektroner bundna i en GaAs-AlGaAs kvantbrunn som används bla i laserdioder.

Uppgifter

1. För att undersöka hur bra metoden är ska vi först studera ett fall där lösningen är känd. Den bifogade koden `eigenstates.py` löser tidsberoende SE för en elektron i en endimensionell oändlig lådpotential med bredd $a = 1$ nm. Kör koden för att bestämma egenvärdena för grundtillståndet och några exciterade tillstånd:

$E_n = \hbar^2(n\pi/a)^2/(2m)$, $n = 1, 2 : E_1 = 0.3760$ eV, $E_2 = 1.5041$ eV, osv. Den enda parametern i koden som man ska ändra är gissningen på energin E . Prova att ändra E för att se om du kan hitta E_n . Man vet att man har valt rätt värde på energin när lösningen uppfyller $\psi(x=a) = 0$. Koden använder $N = 10^3$ indelningspunkter som inte nödvändigtvis räcker för att få bra noggrannhet i energinivåerna. Experimentera med hur noggrannheten beror på N genom att även prova $N = 10^4, 10^5$, osv. Försök hitta egenvärdena med minst fyra siffrors noggrannhet. Man kan skriva en liten loop som hittar egenvärdet med intervallhalvering om man inte vill skruva på energin för hand.

2. Modifiera koden och implementera en elektron i en kvantprick med ett pålagt elektriskt fält:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, x > a \\ eEx & 0 < x < a \end{cases}$$

Sätt $E = 10$ V/nm och $a = 1.0$ nm. Sök de fem lägst liggande energiegentillstånden och plotta egenfunktionerna. Du behöver inte normera lösningarna även om det är enkelt att göra numeriskt. Startgissningar kan vara $E = 3, E = 4$ eV. Lösningarna är kända och kallas Airyfunktioner, se <http://mathworld.wolfram.com/AiryFunctions.html>.

3. Modifiera potentialen till

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ eEx & 0 < x < a \\ eEa & x > a \end{cases}$$

Utöver potentialen måste man modifiera några ytterligare saker i koden. Nu blir det högra kontinuitetsvillkoret $\psi(x) \rightarrow 0, x \gg a$. Ett sätt att göra detta är att öka övre integrationsgränsen till tex $x = 2a$. genom att ändra

" dx=a/(N+1.0) # step length" till " dx=2*a/(N+1.0) # step length".

Använd en startgissning på energin, tex $E = 3$ eV. Kör koden. Repetera med ett nytt värde på energin, tex $E = 4$ eV. Eftersom dessa kurvor viker av från x-axeln åt olika håll ligger den sökta energin mellan dessa värden, så nästa gissning kan vara $E = 3.5$ eV, osv. Iterera med nya gissningar till dess ett bundet tillstånd hittats, dvs till dess lösningen blir $\psi(x) \rightarrow 0$ för stora x . När man har hittat en uppskattning till energiegenvärdet E så kan man behöva plotta lösningen för att avgöra om integrationsintervallet behöver ökas ytterligare för att se om lösningen verkligen går mot noll för stora x . Bestäm alla bundna tillstånd. Hur många bundna tillstånd finns det? Hur kan man veta att det inte kan finnas fler bundna egentillstånd? Redovisa energiegenvärden och plottar av tillstånden.

2 Dynamik hos vågpaket och tunnling med SPO

Vi ska nu titta på en metod för att lösa tidsberoende SE. Även här kan man använda differensmetoder liknande Verlet, men vi ska studera en mer raffinerad metod som baseras på Fouriertransformering vilket är effektivt och elegant. SPO metoden bygger på mer avancerad teori än Verlet, och teorin som kommer i detta avsnitt är orientering och ingår inte i kurskraven. Om man vill kan man gå direkt till uppgifterna nedan.

Vi ska först representera Schrödingerekvationens tidsberoende på ett nytt sätt som är användbart för simulering. Tidsberoende SE

$$H\Psi = (T + V)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

där $T = p^2/2m$, $V = V(x)$, har den formella operatorlösningen

$$\Psi(x, t) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \Psi(x, t_0) \quad (2)$$

Detta inses genom derivering map t . Denna form kan användas direkt bara om $\Psi(x, t_0)$ är ett känt energiegentillstånd eller om vi vet en fullständig mängd energiegentillstånd, men då behövs inga simuleringar så vi utgår från att detta inte är fallet. För att få en användbar form behövs mer arbete. Inför tidsutvecklingsoperatorn U genom

$$U = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = e^{-i(T+V)(t-t_0)/\hbar} \quad (3)$$

Som vi ska se nedan hade det varit det användbart att kunna splittra detta uttryck för att få

$$e^{-iT(t-t_0)/\hbar} e^{-iV(t-t_0)/\hbar} \quad (4)$$

men denna formel är bara korrekt om T och V kommuterar, och de gör dom bara om V är konstant (fri partikel). Däremot gäller följande symmetriska uppdelning approximativt till ordning $(\Delta t)^3$

$$U = e^{-iV\Delta t/2\hbar} e^{-iT\Delta t/\hbar} e^{-iV\Delta t/2\hbar} \quad (5)$$

Tidssteget Δt måste väljas så litet att lösningen uppfyller den noggrannhet som eftersträvas. Lösningen stegas sedan fram tidssteg för tidssteg genom att applicera U iterativt.

Strategin är nu att använda positionsegenfunktioner för att beräkna $e^{-iV\Delta t/2\hbar}$ och rörelsemängdsegenfunktioner för att beräkna $e^{-iT\Delta t/\hbar}$. Effekten av första och sista faktorn i U är att multiplicera vågfunktionen som i simuleringen definieras på positionerna i ett diskret positionsgitter, med en fasfaktor som är proportionell mot potentialfunktionen som är en funktion av positionerna:

$$\Psi(x, t) \rightarrow e^{-iV(x)\Delta t/2\hbar} \Psi(x, t) \quad (6)$$

För att beräkna faktorn med kinetiska energin sätter vi in en fullständig mängd rörelsemängdseigenfunktioner, vilket motsvarar Fouriertransformering. Egenvärdena till $e^{-iT\Delta t/\hbar}$ blir då $e^{-ip^2\Delta t/2m\hbar}$. Dessa behöver transformeras tillbaka till positionsbasen, vilket sker med invers Fouriertransformation. Den slutliga formeln för tidsutvecklingen under tidssteget Δt blir därför:

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-iV(x)\Delta t/2\hbar} F^{-1}[e^{-ip^2\Delta t/2m\hbar} F[e^{-iV(x)\Delta t/2\hbar} \Psi(x, t)]] \quad (7)$$

där F betecknar Fourier-transformation till rörelsemängdsrepresentationen, och F^{-1} invers Fourier-transformation tillbaka till positionsrepresentation. Detta ser lite krångligt ut men är enkelt att koda genom att använda inbyggda Fast Fourier Transform (FFT) rutiner som exekverar snabbt.

Uppgifter

1. Den bifogade koden `splitoperator.py` simulerar ett Gaussiskt vågpaket som krockar med en oändlig potentialvägg. Koden animerar $|\Psi(x, t)|^2$. Kör koden och se till att animationen fungerar. Vågpaketet ska röra sig på skärmen. Notera breddningen av vågpaketet som funktion av tiden. Notera även interferensen som uppstår när vågpaketet reflekteras mot väggen. Bifoga figur som visar interferensen i rapporten. Diskutera om interferensmönstret är verkligt eller ett fel på grund av approximationer i den numeriska lösningen?

2. Modifiera potentialen så att en ändlig potentialbarriär fås och studera tunnling. Denna potential finns redan kodad i programmet, ta bara bort kommentarstecknena. Lämpliga intervall: $a = 10.0, k_0 = 1.0, x_0 = -20.0, w = 1.0, V_0 = 1.0$. OBS: a är vågpaketets bredd, w är potentialens bredd. I koden används s.k. naturliga enheter med konstanter som tex \hbar satta till 1, vilket inte påverkar frågan som vi vill studera här. Uppgiften är att bestämma transmissions och reflektions sannolikheterna. Uppskatta T och R från de animerade kurvorna för de transmitterade och reflekterade vågpaketerna så här. Låt a vara maxvärdet på $|\psi|^2$ för det transmitterade vågpaketet, och b maxvärdet för det reflekterade vågpaketet. Bestäm a, b genom avläsning i figuren vid en tidpunkt efter tunnelpassagen då vågpaketet helt har lämnat området med potentialen. Använd grafikrutans zoom-funktion för att få bra noggrannhet i de avlästa värdena på a, b , eller bättre, låt pythonprogrammet hitta och skriva ut maxvärdena. Sedan bestäms T, R genom $T = a/(a + b), R = b/(a + b)$. Bifoga figur från animationen som visar vågpaketet efter tunnlingen. Att fundera på: Griffiths formler (Problem 2.33) gäller för ett k-värde. Här är de tunnlande tillstånden i stället vågpaket som är en superposition av många k-värden. Kommer Griffiths formler att fungera bättre för ett brett eller ett smalt infallande vågpaket? Förklara!

3. Studera Fowler-Nordheim tunnling. En enkel modell av ledningselektroner i en metall med en ytbarriär ges av partiklar i en ändlig potentiallåda. Ytbarriären kan modelleras som ett potentialsteg: $V(x) = 0, x < 0$ inuti metallen, och $V(x) = V_0, x > 0$ utanför metallen. För tillstånd med energi $E < V_0$ kommer inga elektroner att kunna tunnla ut ur metallen: allt reflekteras vid potentialsteget. Demonstrera detta genom att implementera ett potentialsteg $V_0 = 1$ i $x = 0$. Välj ett brett vågpaket, och tag rörelsemängden $p_0 = \hbar k_0$ så att energin $p_0^2/2m < V_0$. Lämpliga värden: $a = 10, k_0 = 1$. Genom att lägga på ett elektriskt fält i x-riktningen kan elektroner fås att tunnla genom ytan, vilket kallas fältemission. Som en förenklad modell av potentialen tas $V(x) = 0, x < 0$ inuti metallen, och $V(x) = V_0(1 - x/L), 0 < x < L$ och $V(x) = 0, x > L$ utanför ytan. Detta motsvarar elektriska fältet $\mathcal{E} = V_0/L$. Välj $L = 4$. Demonstrera med simulering att detta ger upphov till tunnling. Man kan visa (med WKB-metoden) att tunnelströmmen varierar ungefär exponentiellt med $V_0^{3/2}$. Undersök detta samband genom att plotta dina resultat för $\ln T$ mot $V_0^{3/2}$ för $V_0 = 0.6, 0.7, 0.8, \dots$

Extrauppgift (ej krav för godkänt på labben)

Undersök vad som händer vid spridning mot potentialen

$$V(x) = -2/\cosh^2(x)$$

3 Rapportering

En skriftlig rapport ska skrivas individuellt på dator (inte för hand) och lämnas in individuellt. Längden är valfri men 3-5 sidor är ett riktmärke. Rapporten ska kortfattat beskriva frågorna och svaren samt visa de efterfrågade resultatfigurerna från simuleringarna. Inlämningen sker elektroniskt med Canvas.