

## LABORATION I TEORETISK FYSIK SI1155 2023

### Simulering inom kvantmekaniken

Inom forskning och utveckling är datorsimulering numera ofta ovärderliga verktyg för numerisk lösning av komplexa problem och undersökning av viktiga modellens egenskaper. Simulering ger ett mycket användbart komplement till analytiska metoder, och kan vara enda metoden om analytisk lösning inte är tillgänglig. Här kommer tre vanliga metoder att studeras: verletmetoden och matrisdiagonalisering för att hitta stationära tillstånd, samt operatorsplittring för att studera dynamik hos vågpaket. Här studeras enkla problem men poängen är att metoderna är mycket kraftfulla och fungerar lika bra i mer komplicerade fall.

Laborationen utförs enskilt eller genom samarbete i mindre grupper. Assistans med laborationen ges i första hand på en av övningarna. Laborationen kan även göras hemma. Det går att kontakta lärarna vid behov.

Laborationen utförs på egen laptop. Man utvecklar och testar på egen dator, och har därmed alltid tillgång till sina program. Produktionskörningar kan man sedan vid behov göra på större datorer. Om man inte har tillgång till egen laptop dator så kan man samarbeta med någon som har dator.

Man ska utgå från de bifogade pythonkoderna som ska köras och modifieras på egen dator. Python ska finnas förinstallerat i de flesta datorer. Koderna använder numpy, matplotlib, scipy som behöver installeras om de inte redan finns. Man kan editera och köra koden bekvämt med tex idle eller Visual Studio Code.

## 1 Energiegentillstånd 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 differenser. 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 tidsoberoende 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 och ges av

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

Det globala felet är av ordning  $(\Delta x)^2$ .

För att hitta bundna egentillstånd till energin och energiegenvärdena 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  $\Psi$  inte går mot noll utanför potentialen behöver gissningen på  $E$  justeras. 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  $\Psi(a) = 0$ .

Detta kallas för skytte-metoden (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. Vi bryr oss inte om normering här (det är enkelt att fixa) eftersom det inte påverkar värdet på energiegenvärdena. Denna metod fungerar utmärkt för problem med bundna tillstånd och kan ofta enkelt ge egenvärdena med tillräckligt många siffrors noggrannhet.

## 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:  $E_n = \hbar^2(n\pi/a)^2/(2m)$ . 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  $\Psi(x = a) = 0$ .

Undersök hur noggrannheten i lösningen beror på  $N$  genom att prova  $N = 10^3, 10^4, 10^5$ , osv. Plotta integrationsfelet som ges av värdet på  $|\Psi(x = a)|$  som funktion av  $N$  i en loglog plot med datapunkter markerade med symboler. Plotta även

det teoretiskt väntade felet=konstant/ $N^2$  som en heldragen linje med värdet på konstanten vald så att graferna sammanfaller så bra som möjligt. Loglog-skala är lämplig för att plotta en potenslag eftersom kurvan blir en rak linje. Bifoga figuren i rapporten. Figurer ska ha rubrik på axlarna.

Välj ett lämpligt värde på  $N$  och förklara varför det värdet är ett bra val. Bestäm de fem lägsta energieigenvärdena och jämför med den exakta lösningen. Man kan skriva en liten loop som hittar egenvärdena med intervallhalvering om man inte vill söka energieigenvärdena för hand. Ange energieigenvärdena i rapporten och bifoga figurer som visar några lösningar  $\Psi_n(x)$ .

Två viktiga slutsatser som ska återanvändas i problemen nedan:

- (1) Diskretiseringsfel minskar om diskretiseringen minskar.
- (2) Försök plotta data så att kurvan blir en rak linje.

## 2. Modifiera potentialen till en harmonisk oscillator med

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{x^2}{2}$$

där konstanterna satts till  $m = \omega = \hbar = 1$  så att energieigenvärdena blir  $E_n = n + 1/2$ . Sätt  $dx=4/N$  så att området där  $\Psi \rightarrow 0$  tas med i integrationen. Potentialen finns redan kodad och bortkommenterad i koden, ta bara bort kommentarstecknen. Bekräfta att grundtillståndet fås med  $n = 0$  och  $E = 1/2$ .

Modifiera sedan potentialen till den anharmoniska oscillatorn med

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{x^2}{2} + x^4$$

Sök jämna och udda egenfunktioner genom att välja initialvillkoren  $\Psi(0) = 1, \Psi'(0) = 0$  (jämn) eller  $\Psi(0) = 0, \Psi'(0) = 1$  (udda). Starta med en gissning på  $E$ , tex  $E = 0.4$ . Justera värdet på  $E$  för att få egentillstånd som uppfyller  $\Psi \rightarrow 0$  och  $\Psi' \rightarrow 0$  i det klassiskt förbjudna området där  $E < V$ . Om inte  $\Psi, \Psi' \rightarrow 0$  så är inte  $E$  ett energieigenvärde och gissningen behöver justeras. Redovisa de 4 första energieigenvärdena och plotta de tillhörande egentillstånden.

Genom att räkna antalet nollställen för  $E = 30$ , förklara hur många egentillstånd det finns med energieigenvärde  $E_n < 30$ . Undersök både den jämna och den udda lösningen.

## 2 Matrisdiagonalisering

Här ska problem 2 ovan lösas med en matrisdiagonaliseringsmetod. Trunkera Hilbertrummet till de 10 lägsta energinivåerna:  $n = 0, \dots, 9$ . Genom att öka dimensionen fås bättre noggrannhet. Mha stegoperatorer fås matrisrepresentationen (övning 5, problem 3.33)

$$x_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1})$$
$$p_{mn} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\delta_{m,n-1})$$

Dessa kan användas för att beräkna matrisen  $H_{mn}$  med matrismultiplikation. Sedan kan egenvärdena bestämmas med matrisdiagonalisering.

### Uppgifter

3. Kör den bifogade koden `diagonalize.py` som beräknar egenvärden till  $H$  för den harmoniska oscillatorn. I koden sätts  $m = \hbar = \omega = 1$ . Kontrollera överensstämmelsen med de exakta energiegenvärdena  $E_n = n + 1/2$ . Kommentera eventuell avvikelse. Modifiera koden så att den anharmoniska oscillatorn ovan studeras och bestäm egenvärdena. Öka det trunkerade Hilbertrumets dimension från  $\dim=10$  till 20, 30 osv tills de 10 första egenvärdena inte ändras. Plotta egenvärdena som funktion av  $n$ . Kommentera överensstämmelsen med uppgift 2.

## 3 Dynamik hos vågpaket och tunnling med SPO

Nästa metod löser tidsberoende SE. Även här kan differensmetoder liknande Verlet användas, men i stället ska en elegant metod som baseras på Fouriertransformering studeras. SPO metoden bygger på mer avancerad teori än Verlet. Teorin i detta avsnitt är orientering och ingår inte i kurskraven så det går bra att gå direkt till uppgifterna.

Först ska Schrödingerekvationens tidsberoende representeras 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 en fullständig mängd energiegentillstånd är känd, men då behövs inga simuleringar. Här antas att detta inte är fallet. För att få en användbar form behövs mer arbete. Inför tidsutvecklingsoperatoren  $U$  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  $\Delta t$  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 rörelsemängdsegenfunktioner, vilket motsvarar Fouriertransformering. Egenvärdena till  $e^{-iT\Delta t/\hbar}$  blir då  $e^{-ip^2\Delta t/2m\hbar}$ . Dessa behöver transformeras tillbaks till positionsbasen, vilket sker med invers Fouriertransformation. Den slutliga formeln för tidsutvecklingen under tidssteget  $\Delta t$  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 tillbaks 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

4. 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 animeringen fungerar så att vågpaketet rör sig. Notera breddningen av vågpaketet som funktion av tiden. När vågpaketet reflekteras mot väggen uppstår interferens. Är denna interferens verklig eller ett diskretiseringsfel? På samma sätt som i uppgift 1 kan man avgöra om felet beror på diskretiseringen.

5. 1928 formulerade Gamow teorin för alfasönderfall [Griffiths sid 360-361]. En radioaktiv kärna sönderfaller genom att spontant avge en alfapartikel som består av två protoner och två neutroner. Alfapartikeln tunnlar genom en Coulombbarriär som ges av potentialen

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & x < R \\ C/x & x > R \end{cases}$$

där  $R$  är kärnans radie. Potentialen finns kodad och bortkommenterad i programmet. Här ska sönderfallet studeras kvalitativt och konstanterna sätts till  $V_0 = 0, R = C = 1$ . Alfapartikeln modelleras med ett gaussiskt vågpaket med kinetisk energi  $E = \hbar^2 k_0^2 / (2m)$ . Beräkna transmissionssannolikheten  $T$  för flera värden på  $E$  ( $0 < E < 1$ ) och plotta resultatet.  $T$  uppskattas så här: Välj sluttiden  $t_{\max}$  för varje  $E$  så att de spridda vågpaketerna har slutat interferera. Bestäm maxamplituden hos det transmitterade och reflekterade vågpaketet  $Y_T, Y_R$  vid sluttiden. Transmissionssannolikheten uppskattas som andelen  $T = Y_T / (Y_R + Y_T)$ . Normeringen gör att uppskattningen uppfyller  $T + R = 1$ . Enligt Gamows teori är  $T \propto \exp(-\text{konstant}/\sqrt{E})$ . Kontrollera om datat stämmer med detta genom att plotta  $\ln T$  mot  $1/\sqrt{E}$  som ger en rak linje enligt teorin. Detta är samma metod som används i problem 1. Kommentera överensstämmelsen.

## 4 Rapportering

En kortfattad skriftlig rapport ska skrivas individuellt på dator och lämnas in som en pdf fil i canvas. Längden är valfri. Rapporten ska innehålla frågorna och svaren samt figurer från simuleringarna. Figurerna ska ha rubriker på axlarna och vara välgjorda. Inlämningen sker elektroniskt med Canvas.