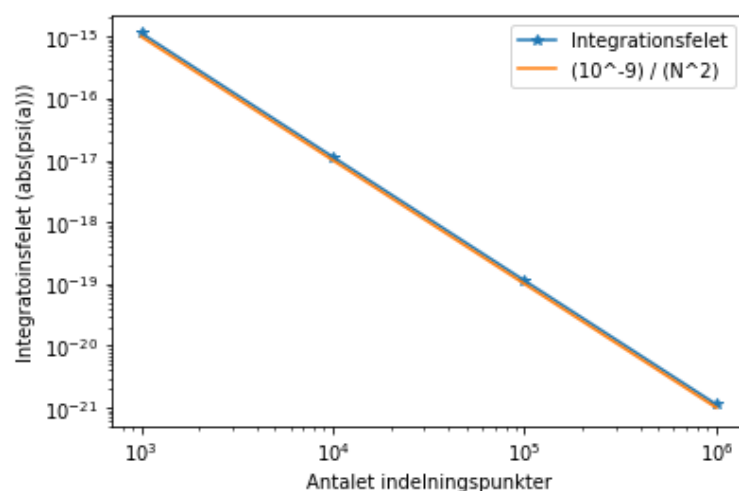


Laborationsrapport Teoretisk fysik

1.



Denna figur är i loglog skala med basen 10. Om felet skulle avta proportionellt mot $\frac{1}{N^2}$ där är antalet indelningspunkter, så skulle en loglog plot visa detta som $\log\left(\frac{1}{N^2}\right) = -2 * \log(N)$, det vill säga som en rätt linje vilket är exakt vad vi ser i figuren. Om vi plottar kurvan $\frac{10^{-9}}{N^2}$ så ser vi att vi får en nästintill perfekt överensstämmelse och vi kan därför dra slutsatsen att felet avtar som $\frac{1}{N^2}$ samt att integrationsfelet ges av $\frac{10^{-9}}{N^2}$.

Den huvudsakliga fördelen med att markera datapunkterna som symboler och samtidigt binda den samma till en kurva är att du ser exakt vilka datapunkter och hur många som ligger till grund för anpassningen till kurvan vilket gör det möjligt att uppskatta tillförlitligheten i anpassningen. Detta skulle inte vara möjligt om man istället valde att enbart inkludera den anpassade kurva men inte inkludera datapunkterna.

Enligt den ovanstående figuren blir felet 10^{-17} då $N = 10\,000$, vilket jag bedömer som mer än tillräckligt litet så jag fortsätter med $N = 10\,000$. Kuran för vågfunktionerna ser dessutom slät och fin ut för detta N . Vidare så är det maximala värdet på vågfunktionen ψ för grundtillståndet av storleksordningen 10^{-10} vilket ytterligare påvisar att ett fel på 10^{-17} är tillräckligt litet.

Jag använder mig av intervallhantering för att hitta de fem första energinivåerna med fyra värdesiffrors noggrannhet. Intervallet valdes med hjälp av att uppskatta energierna med hjälp av den givna uppskattningen på grundtillståndetsenergin $E_1 = 0.37 \text{ eV}$ samt att $E_n = E_1 * n^2$. Detta gav en grov uppskattning för energin i det n:te egentillståndet vilket användes för att bestämma intervallet. Följande kod användes för att hitta dessa energiegenvärden med undantaget att funktionen sol retunerar psi och inte dess absolutbelopp som användes för att hitta integrationsfelet.

```

def sol(N, EeV=(hbar*np.pi/a)**2/(2.0*m)/e):
    x = 0.0
    psi = 0.0
    dps1 = 1.0
    dx=a/N
    dx2=dx**2
    E = EeV * e

    for i in range(N):
        d2psi = c*(V(x)-E)*psi
        d2psinew = c*(V(x+dx)-E)*psi
        psi += dps1*dx + 0.5*d2psi*dx2
        dps1 += 0.5*(d2psi+d2psinew)*dx
        x += dx
    return abs(psi)

N = [1000, 10000, 100000, 1000000]
psi_vals = []
for n in N:
    psi_vals.append(sol(n))

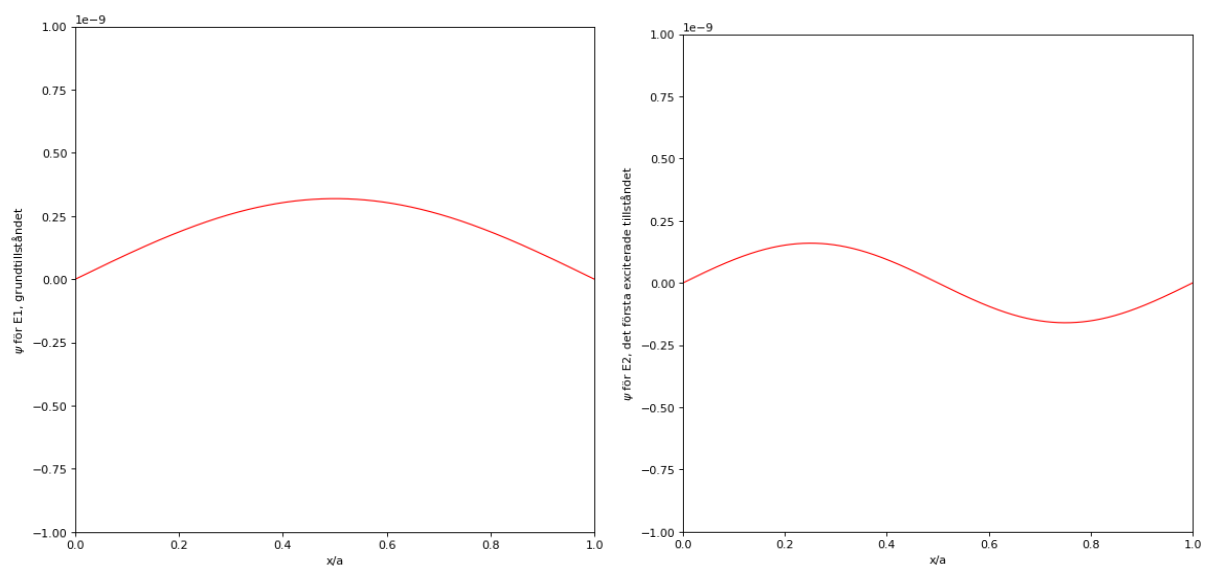
# plt.loglog(N, psi_vals, marker='*', linestyle='-')
# plt.xlabel('Antalet indelningspunkter')
# plt.ylabel('Integrationsfelet (abs(psi(a)))')

def hitta_energi(E_left, E_right):
    while True:
        E = (E_right + E_left)/2
        psi = sol(1000, E)
        if abs(psi) < 1e-11:
            return E
        elif psi > 0:
            E_left = E
        else:
            E_right = E

```

Detta ger de fem första energinivåerna med fyra värdesiffror till $E_1 = 0.3760 \text{ eV}$, $E_2 = 1.550 \text{ eV}$, $E_3 = 3.385 \text{ eV}$, $E_4 = 6.018 \text{ eV}$, $E_5 = 9.410 \text{ eV}$. Detta kan jämföras med de exakta energieigenvärden som med fyra värdesiffrors noggrannhet ges av $E_1 = 0.3760 \text{ eV}$, $E_2 = 1.504 \text{ eV}$, $E_3 = 3.384 \text{ eV}$, $E_4 = 6.018 \text{ eV}$, $E_5 = 9.401 \text{ eV}$. Vi ser att de uppskattade energieigenvärden stämmer mycket bra överens med de exakta. Naturligtvis skulle vi kunnat få ännu bättre precision genom att i koden kräva att $\text{abs}(\text{psiE})$ ska vara mindre. Men det är samtidigt en avvägning mot körtiden och jag bedömer att den nuvarande noggrannheten är tillräckligt bra.

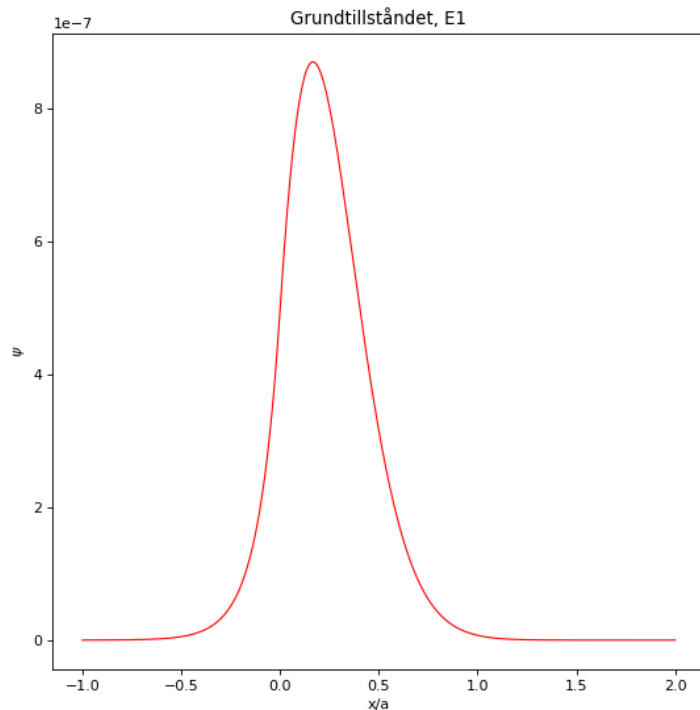
Om vi använder de exakta energieigenvärdena får följande två plottar för vågfunktionen för grundtillståndet och det första exciterade tillståndet.

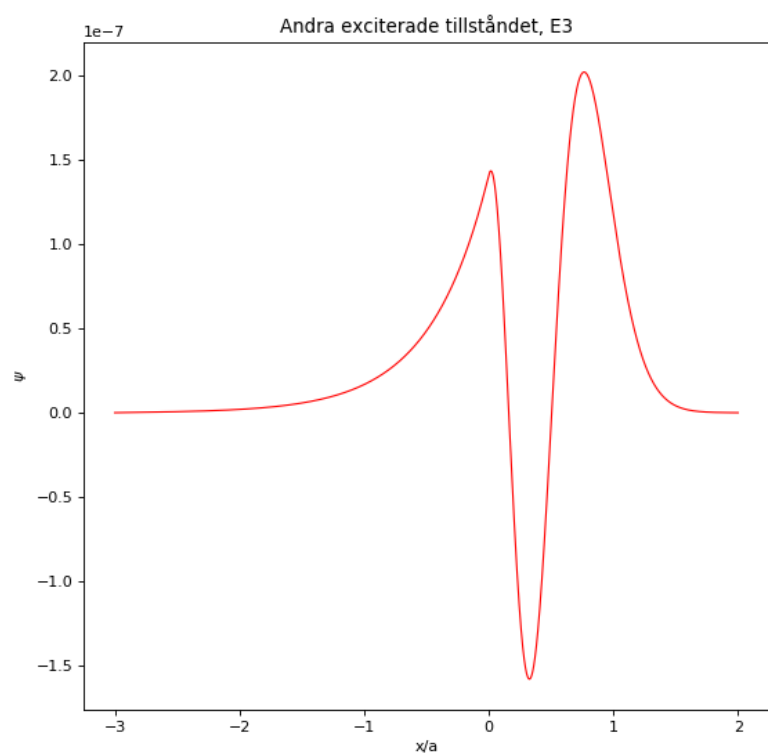
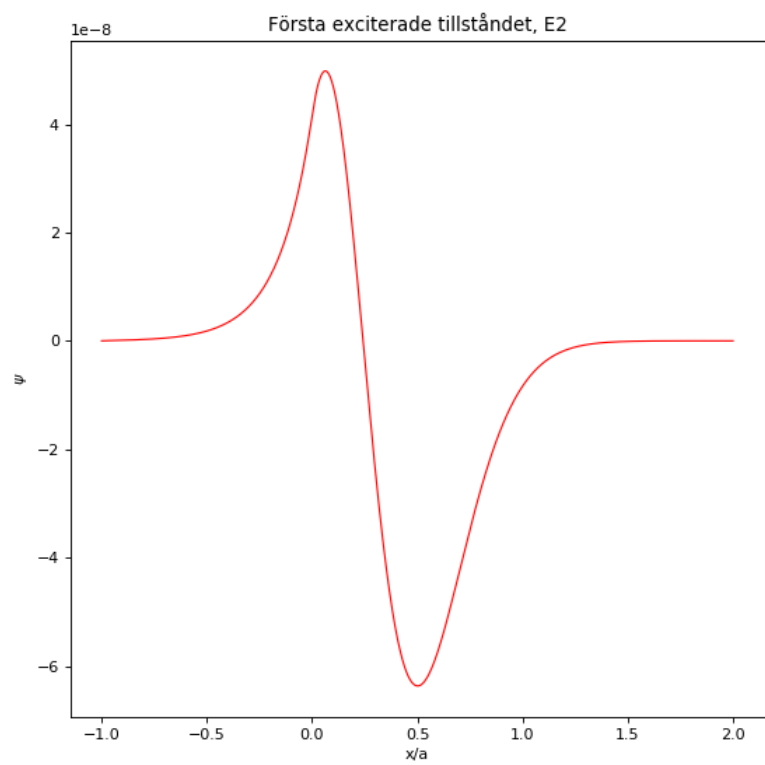


2.

Efter att ha ändrat i koden och tillämpat intervallhalvering på samma sätt som i fråga 1 fås energierna $E_1 = -3.16443541839839 \text{ eV}$, $E_2 = -1.48986967975567 \text{ eV}$, $E_3 = 0.17335286009319842 \text{ eV}$. För att få de initiala gissningarna för energierna som ändrade jag energierna för hand tills jag hittat ett intervall där vågfunktionen bytte tecken och använde det intervallet som start i min intervallhanteringsalgoritm som ser i stort sett likadan ut som i fråga 1. Figurerna nedan visar vågfunktionerna för samtliga bundna tillstånd. Vi kan vara säkra på att det bara kommer finnas tre bundna tillstånd eftersom vågfunktionen för $E = 0$, som ej är ett bundet tillstånd, har två nollställen för x mellan noll och a . Därmed kan det bara finnas två exciterade tillstånd plus grundtillståndet vilket totalt är tre tillstånd. Därmed vet vi att vi har hittat alla bundna tillstånd.

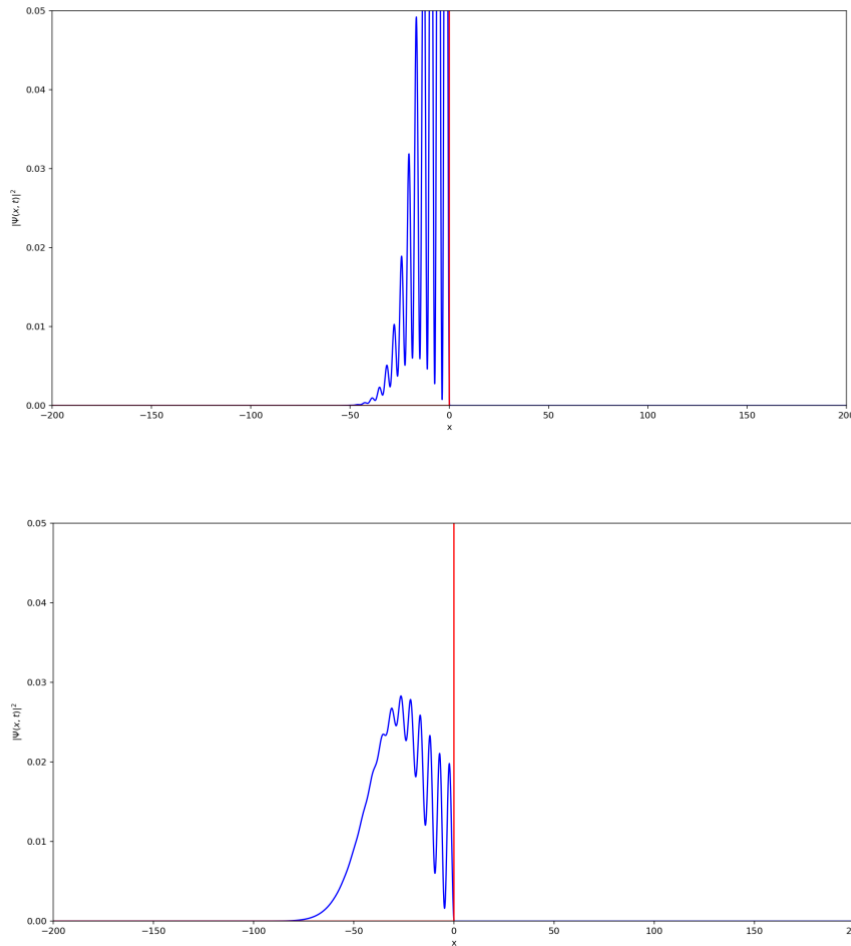
För det andra exciterade tillståndet behövde jag utvidga integrationsgränsen på vänster sida till $-3*a$ för att derivatan av vågfunktionen skulle gå mot noll vid intervallets ändpunkter.





3.

Följande två figurer påvisar den inkommande och den reflekterande vågen interfererar med varandra.

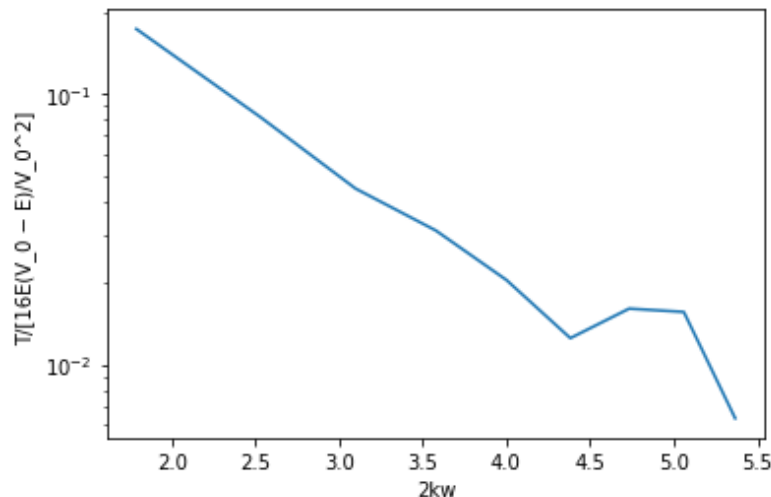


För att avgöra om interferensmönstret är verkligt eller om det uppkommer som ett fel på grund av diskretiseringen så förfinar jag diskretiseringen genom att minska dx i koden. Då finner jag att interferensmönstret är kvar och ser i princip likadant ut. Därmed är interferensmönstret inte en effekt av diskretiseringen då det är oförändrat då diskretiseringen förfinas.

4.

Vi vill nu uppskatta transmissions och reflektionssannolikheterna för olika värden på energin, mer specifikt för $E = 1, 0.9, \dots, 0.1$. Vi får givet att energin ges av $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$. Naturliga enheter och konstanterna har därför satts till ett och det blir således lätt att variera k_0 för att få de önskade energierna. Vi uppskattar transmissionsannolikheten genom $T = \frac{Y_T}{Y_T + Y_R}$ där Y_T, Y_R är maxamplituden för den transmittade respektive reflekterade vågpaketet vid stopptiden. Normeringen gör sedan så att $R = 1 - T$.

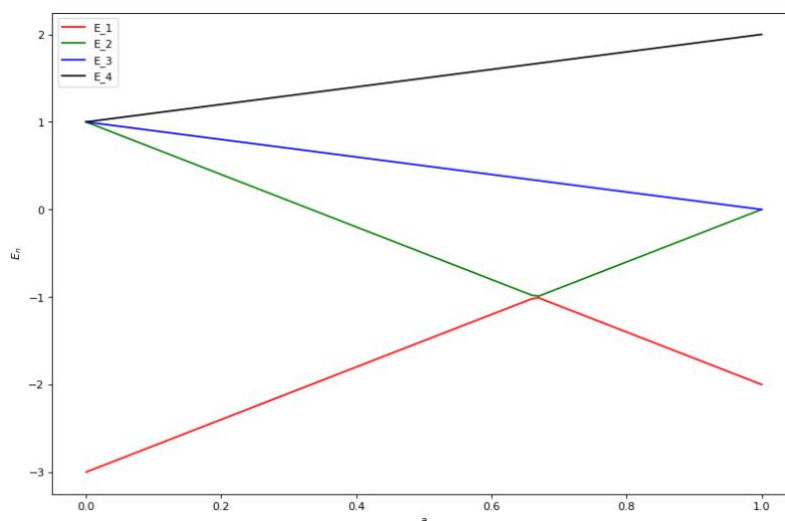
Detta ger $T = 0.31, 0.25, 0.21, 0.15, 0.12, 0.082, 0.048, 0.054, 0.040, 0.0091$ för $E = 1, 0.9, \dots, 0.1$. Reflektionssannolikheten fås sedan som $R = 1 - T$. Om vi jämför detta med tunnlingsformlen $T \approx 16E(V_0 - E)e^{-2kw}$ och sedan plottar $T/[16E(V_0 - E)/V_0^2]$ mot $2kw$ där $k = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ fås följande figur som är en linlog plot. Jag valde att inte inkludera $E = 1$ samt tillhörande transmissionssannolikhet för att undvika division på noll.



Om resultaten följer tunnlingsformlen förväntar vi oss att lin-log plotten ska ge en rak linje. Utöver precis i nedre högra hörnet så uppvisar linjen ett relativt tydligt linjärt förhållande. En anledning till detta skulle kunna vara att jag mätte maxamplituden i simuleringen för hand. Speciellt vid långa energier då maxamplituden var liten var det svårt att göra en säker mätning vilket skulle kunna förklara utseendet på linjen i början.

Men utöver i början så verkar trenden ändå i viss mån vara linjär vilket säger oss att tunnlingsformeln är tillämpbar. Dock är det svårt att säga i vilken utsträckning då mätvärdena av maxamplituden är förknippade med en viss osäkerhet.

5.



Vi ser att degenererade egentillstånd uppstår vid två olika tillfällen. För $a = 0$ fås en trefaldig degenerering med egenvärdet ett och sedan vid $a = 1$ har vi en tvåfaldig degenerering med egenvärdet noll. Vi kan notera att för $a \approx 0.66$ så verkar det som att den gröna och röda kurvan ska korsa varandra men istället vänder och "tar över" den andras energibana.