

Frist for innlevering: *Mandag 18. mars kl 17*

ØVING 7

Denne øvingen krever kjøring av Matlab-programmer, så ta med PC (om du ikke vil bruke datasalen). Prøv også å gjøre unna forarbeidet (med innføring av dimensjonsløse variable osv) før veiledningstimene. Last også ned Matlab-programmet som ligger på hjemmesiden. Også punktene **a, b og f** i oppgave 9 – 2 løses vha dette Matlab-programmet. Resten av oppgave 7 – 2 må du kanskje gjøre enten før eller etter veiledningen. Bare oppgave 7 – 1 kreves besvart for å få øvingen godkjent.

Oppgave 7 – 1 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen

Innledning

I denne oppgaven skal vi bruke en numerisk metode til å bestemme energier og egenfunksjoner for bundne tilstander i et endimensjonalt potensial $V(q)$.

Oppgaven er et ledd i instituttets bestrebelser på å styrke studentenes (og lærernes) kompetanse når det gjelder bruk av simulering og andre redskaper innen anvendt matematikk, numerikk og IKT. Jeg anbefaler alle å gjøre denne oppgaven.

Oppgaven gjennomføres vha Matlab, men kan også gjøres vha *octave*. Det er fint om dere kan programmere selv, men som en hjelp legges det ut et Matlab-program på hjemmesiden. (En kopi av dette finner du nedenfor).

Dimensjonsløse variable

I numerisk arbeid bruker vi dimensjonsløse variable. La oss ta den endimensjonale harmoniske oscillatoren, med Schrödingerligningen

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

som et eksempel. Her vet vi at $\sqrt{\hbar/m\omega}$ har dimensjon lengde, og faktisk også er en *karakteristisk* lengde for oscillatoren. Da er det naturlig å innføre

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

som en dimensjonsløs koordinat. Ved å dividere (1) med $\hbar\omega$, finner vi da at den tar formen

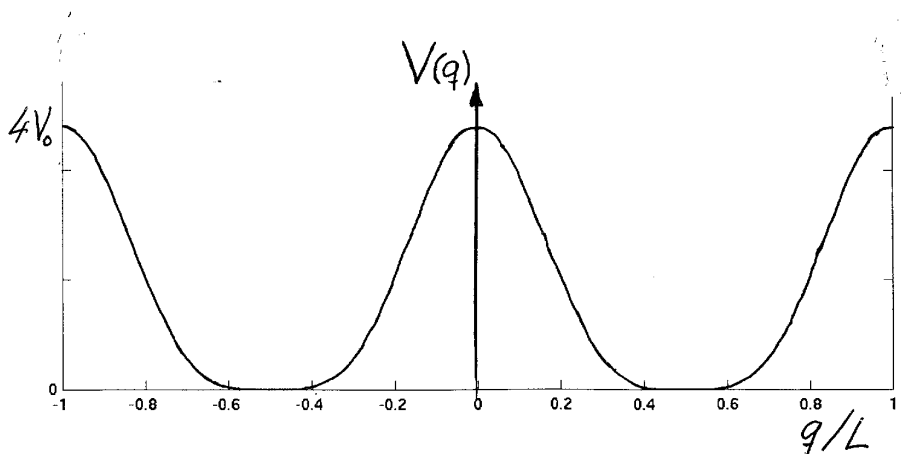
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi = \epsilon \psi. \quad (2)$$

a. ♠ Gjennomfør dette, dvs utled (2) fra (1), og finn “potensialet” $v(x)$ uttrykt ved x , samt forbindelsen mellom den dimensjonsløse egenverdien ϵ og den virkelige energien E . [Som du sikkert skjønner, kan den tidsuavhengige Schrödingerligningen skrives på denne måten for alle endimensjonale potensialer $V(q)$, med passende definisjoner av x , $v(x)$ og ϵ .]

b. I denne oppgaven skal vi bl.a studere egenfunksjoner og spesielt energier for et litt spesielt potensial, som ligner på en boks ved at det er uendelig for $|q/L| > \frac{1}{2}n_L$. Det er imidlertid ikke flatt i bunnen mellom de harde veggene, men har formen

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

Dette potensialet er periodisk med periode-lengde L . Vi lar boksen inneholde n_L perioder, slik at lengden er $n_L L$. Figuren viser $V(q)$ for en boks med $n_L = 2$ perioder:



♠ Innfør den dimensjonsløse koordinaten $q/L = x$, og finn $v(x)$ (uttrykt ved x og n_L) og ϵ i dette tilfellet. (Jf (1).) [Merk at $\hbar^2/mL^2$ har dimensjon energi. For $m = m_e$ og $L = 2a_0$, f.eks, 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 omkring 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 verdiene av ψ i punktet x og de to nabopunktene $x \pm s$:

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

Ved at vi har neglisjert ledd nr 2 (osv) på høyresiden i (3), må vi regne med at den relative feilen i uttrykket (4) for ψ'' blir av orden s^2 . (Jf pkt. **c** nedenfor.)

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

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

I programmet (se nedenfor) er de diskrete x -verdiene

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

samlet i et array $x(1 : N + 1)$. Verdiene av ψ i disse punktene, som foreløpig er ukjente, kan vi tenke oss plassert i et array $\psi(1 : N + 1)$, og (de kjente) verdiene av potensialet $v(x)$ i de samme punktene plasserer vi i $V(1 : N + 1)$. Vi trenger også ψ'' i disse punktene. Vi antar at $x_{\min}$ og $x_{\max}$ velges slik at vi med god tilnærming kan sette $\psi(x_{\min} - s) = 0$ og $\psi(x_{\max} + s) = 0$. Da har vi (med tilnærmelsen (4))

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

Ligning (2) gir $N + 1$ ligninger:

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

I disse ligningene setter 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 ligningene skrives på matriseform:

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

Her er alle elementene som ikke er skrevet opp i Hamilton-matrisen til venstre lik null. Denne såkalte tridiagonale matrisen kan diagonaliseres vha en (modal) matrise S :

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

Elementene i den diagonale matrisen D er da egenverdiene ϵ_n ($n = 1, \dots, N + 1$) til Hamilton-matrisen H , altså energiegenverdiene i dimensjonsløs utgave, jf (2). Søylene i transformasjonsmatrisen S er de tilhørende energiegenfunksjonene, $\psi_n(1 : N + 1)$. Merk at dette systemet tilsvarende grensebetingelsene

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

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

c. ♠ Velg først harmonisk oscillator-potensial, ved å fjerne et kommentartegn “%” i Matlab-programmet. Sett $X_{max} = 10$ og finn grunntilstandsenergien ved å regne med N lik henholdsvis, 640, 320, 160 og 80. Påvis at feilen i de numeriske resultatene er proporsjonal med s^2 , slik vi måtte vente ut fra (3) og (4).

Når programmet kjøres (f.eks for $N=640$), kommer det ut bl.a et diagram som viser ϵ_n som funksjon av n . ♠Hvordan skal denne kurven oppføre seg teoretisk? (Jf spektret av egenverdier for den harmoniske oscillatoren.) ♠Hvorfor avviker de numeriske resultatene ganske mye fra de teoretiske, unntatt for forholdsvis små n ? [Hint: Se på grensebetingelsene i forhold til de teoretiske klassiske vendepunktene. Kan du regne med at metoden vil fungere med en tilstand som har vendepunkter *utenfor* intervallet mellom $x_{\min}$ og $x_{\max}$? Det kan også være en idé å gjenta beregningen med $x_{\max} = 20$.]

d. For den harmoniske oscillatoren må $x_{\max}$ (rimeligvis) velges noe større enn avstanden til det klassiske vendepunktet for en gitt tilstand, for at denne og den tilhørende egenverdien skal komme ut noenlunde nøyaktig. Vi skal nå prøve metoden på en 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 boks-lengden er n_L).

Her må vi være litt mer nøye med valget av $x_{\min}$ og $x_{\max}$. Programmet vårt er basert på grensebetingelsene $\psi(x_{\min} - s) = \psi(x_{\max}) = 0$. Disse må vi nå matche mot boks-betingelsene $\psi(\pm \frac{1}{2}n_L) = 0$. 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 $x_{\max} - x_{\min} = Ns$ betyr dette at boksen er delt i $N + 2$ intervaller med lengde $s = n_L/(N + 2)$. Overbevis deg om at vi da må bruke

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

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

Bruk dette og kjør programmet med boks-potensialet og med $N = 800$. ♠Sammenlign resultatene for ϵ_n med de teoretiske, som er

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

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

e. Velg nå potensial nummer 5 i programmet (beskrevet i pkt. **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 først med $n_L = 1$, som svarer til én periode. Velg v_0 lik 30. I den ene figuren som skrives ut finner du $v(x)$ og de ti laveste egenverdiene ϵ_n . ♠Les ut de klassiske vendepunktene for $n = 1$ og $n = 2$, og sjekk om de to bølgefunksjonene ψ_1 og ψ_2 krummer slik de skal. ♠Skriv ned verdiene til ϵ_1 og ϵ_2 . ♠Print også ut $2\epsilon_1/\pi^2$ og $2\epsilon_2/\pi^2$ og sammenlign med de tilsvarende verdiene under pkt. **d**. Hvorfor blir ϵ_1 og ϵ_2 større her enn i pkt. **d**? ♠Sjekk hvor mye ϵ_{10} og ϵ_{20} har økt fra pkt. **d** til pkt. **e**, og sammenlign økningen med gjennomsnittet av $v_0[1 + \cos(2\pi(x - n_L/2))]^2$, som er $3v_0/2$.

f. Prøv så med $n_L = 2$ (dvs med dobbelt så stor vidde, slik at det blir plass til 2 perioder). ♠Skriv ned de fire laveste egenverdiene, og sammenlign med resultatene fra forrige punkt. ♠Ta ut et diagram som viser de tilsvarende egenfunksjonene, merk av hva som er hva, og legg dette ved besvarelsen. ♠Hvordan kan det ha seg at egenverdiene her blir parvis nesten sammenfallende, og også nesten er de samme som med én periode?

g. ♠ Sett $v_0 = 15$ og $n_L = 5$, og skriv ned de 11 laveste egenverdiene. Poenget her er at disse egenverdiene samler seg i “bånd”, med energigap imellom. Vi ser her begynnelsen av trekk som er typiske for periodiske potensialer, som oppleves f.eks av ledningselektronene i et metall. Mer om dette i faste stoffers fysikk og i TFY4205 Kvantemekanikk II.

♠ Ta ut et diagram som viser de 5 første egenfunksjonene, og marker hva som er hva.

h. ♠ Dersom du føler for det, kan du bruke programmet på et potensial som du selv velger. Har du videre *forslag* til problemstillinger som du synes kunne være interessante å ta opp senere, så tar vi gjerne imot slike.

```
% 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 7 – 2 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for partikkel i tyngdefelt

Denne oppgaven går ut på å finne energien og bølgefunksjonen for grunntilstanden til en partikkel med masse M som beveger seg i et tyngdefelt, over et “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 fra bevegelsen parallelt med gulvet, og regner altså med et endimensjonalt potensial. Med passende dimensjonsløse variable (som vi skal komme tilbake til) trenger vi da å løse ligning (2) i forrige oppgave med

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

Dette er potensial nr 6 i programmet ovenfor, hvor vi setter $\psi = 0$ for $x = 0$ og for $x = XL$ (med en passende valgt XL), og setter $X_{\min} = XL/(N+2)$ og $X_{\max} = XL(N+1)/(N+2)$ (slik at området $0 < x < XL$ deles i $N+2$ intervaller).

a. Bruk programmet (med potensial nr 6) til å finne grunntilstandsløsningen $\psi_1(x)$ av ligning (2) og den tilhørende ϵ -verdien ϵ_1 . Print ut $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_5(x)$ i et diagram og $(\psi_1(x))^2$ i et separat diagram, og legg disse ved løsningen.

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

c. For å finne ut *hvor* store E , $\langle V \rangle$ og $\langle K \rangle$ er må vi finne forbindelsen mellom de dimensjonsløse variablene ϵ , x og variablene E og z . Bruk uskarphetsrelasjonen til å vise at forventningsverdien $\langle z \rangle$ for grunntilstanden må være av størrelsesorden $(\hbar^2/(M^2g))^{1/3}$. [Hint: Usikkerheten Δz vil være av størrelsesorden $\langle z \rangle$. Videre er $\langle p_z \rangle = 0$ (som alltid for bundne tilstander), og $(\Delta p_z)^2 = \langle p_z^2 \rangle$ er av størrelsesorden $2ME_1$, der E_1 er av størrelsesorden $Mg\langle z \rangle$. Merk at vi her ser litt stort på en faktor 2 el. lign. Poenget er å finne ut hvordan $\langle z \rangle$ skalerer med parametrene $\hbar$, M og g .]

d. Innfør

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

velg tallfaktoren f slik at energieigenverdligningen får formen (2) med $v(x) = x$, og finn herved forbindelsen mellom E_1 og ϵ_1 , og dermed grunntilstandsenergien E_1 . Hva blir ditt estimat for $\langle z \rangle$ for grunntilstanden?

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

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 forventningsverdiene av kinetisk og potensiell energi for denne tilstanden.

g. At $\langle z \rangle$ skalerer på den måten vi har funnet ovenfor, kan også finnes vha såkalt dimensjonsanalyse: Sett

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

og bestem eksponentene α , β og γ ut fra kravet om at dimensjonen til $\langle z \rangle$, altså $[\langle z \rangle]$, skal være meter. Hint: Dimensjonene til M , g og $\hbar$ er

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