

LØYSING ØVING 7

Løysing oppgåve 1 Numerisk løysing av den tidsuavhengige Schrödingerlikninga

a) Alle ledda i (1) har sjølvsagt same dimensjon. Ved å dividere likninga med $\hbar\omega$ sikrar vi oss difor at operatoren foran ψ , dvs $\hat{H}/\hbar\omega$, blir dimensjonslaus. Med

$$\frac{d}{dq} = \frac{d}{dx} \frac{dx}{dq} = \sqrt{m\omega/\hbar} \frac{d}{dx} \quad \text{og} \quad \frac{d^2}{dq^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dx^2}$$

finn ein at Schrödingerlikninga (1) kan skrivast på forma (2),

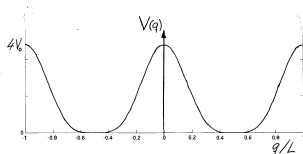
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x), \quad \left(\text{med } x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \right),$$

der

$$v(x) = \frac{V}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}x^2 \quad \text{og} \quad \epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

er det dimensjonslause potensialet og den dimensjonslause energien.

b)



Med $q/L = x$ og divisjon av Schrödingerlikninga med \hbar^2/mL^2 (som har dimensjon energi) finn vi at denne likninga igjen kan skrivast på forma (2), der

$$v(x) = v_0 (1 + \cos[2\pi(x + n_L/2)])^2, \quad v_0 = \frac{V_0}{\hbar^2/mL^2} \quad \text{og} \quad \epsilon = \frac{E}{\hbar^2/mL^2}.$$

c) Vi går nå inn i programmet, set $X_{\max} = 10$, og vel det kvadratiske potensialet $v(x) = \frac{1}{2}x^2$, dvs kommenterer bort m.a det som har med potensialet ovanfor å gjere. Vi kjøyrer etter tur med $N = 640, 320, 160$ og 80 . Resultata for grunntilstanden blir då

$$\epsilon_1 = 0.49997, 0.49988, 0.49951 \text{ og } 0.49804,$$

altså avvik på

$$0.00003, 0.00012, 0.00049 \text{ og } 0.00196$$

frå den eksakte verdien. Kwart av desse trinna svarer til ei firedobling av s^2 . Som ein kontroll kan vi då rekne ut 0.00003047 multiplisert med $1, 4, 16$ og 64 , som gjev

$$0.0000305, 0.000122, 0.00049 \text{ og } 0.00196.$$

Som vi må vente fra (3) og (4), veks altså feilen proporsjonalt med kvadratet s^2 av steglengda. Teoretisk skal vi ha

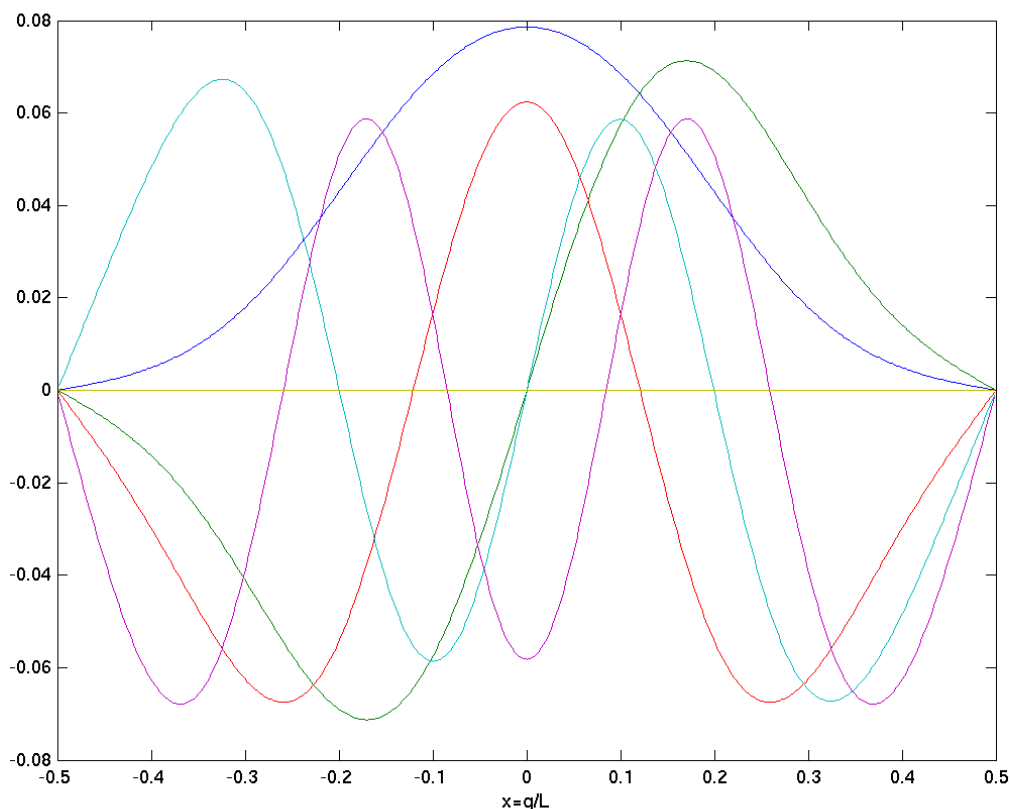
$$\epsilon_n = n - \frac{1}{2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Diagrammet for ϵ_n (for $N = 240$) viser ei kurve som er tilnærma lineær opp til $n \sim 50$, men som ikkje er lineær for større n . Her er altså dei numeriske resultat feil. Forklaringa er at dei klassiske vendepunkta, som teoretisk er bestemt av likninga $V(q_{\pm}) = E_n$, dvs av $x_{\pm} = \pm\sqrt{2n+1}$, ligg utanfor intervallet $X_{\min} < x < X_{\max}$ for $n \gtrsim 50$, og då kan ein sjølvstøtt ikkje vente at resultatane blir gode.

d) Vi vel $N = 800$ og eit boks-potensial med vidde L ($n_L = 1$). Dei teoretiske resultatane er då $2\epsilon_n/\pi^2 = n^2$. Numerisk finn vi for $n = 1, 2$ og 10 0.9999987, 3.99998, og 99.987. Så her fungerer numerikken bra.

e) Frå potensial-diagrammet kan vi lese ut at dei klassiske vendepunkta for $n = 1$ og 2 er

$$x_{\pm} \approx \pm 0.195 \quad \text{og} \quad x_{\pm} \approx \pm 0.285.$$



Dette harmonerer bra med dei to kurvene for ψ_1 og ψ_2 (med 0 og 1 nullpunkt). Her ser vi tydeleg at både ψ_1 og ψ_2 krummar *mot* aksen i dei klassisk tillatne områda (mellom vendepunkta) og *bort frå* aksen i dei klassisk forbodne områda. Merk at ψ_3, ψ_4 osv krummar mot aksen i heile boksen (fordi $E - V$ for desse tilstandane er positiv overalt). For $n = 1$ og 2 merkar vi oss at

$$\epsilon_1 = 13.260 \quad \text{og} \quad \epsilon_2 = 45.635.$$

Vidare er

$$2\epsilon_1/\pi^2 = 2.687 \quad \text{og} \quad 2\epsilon_2/\pi^2 = 9.248,$$

medan vi for den ordinære boksen hadde 1.00000 og 3.99998. Grunnen til auken er at potensialet her gjev mykje mindre klassisk tillatne område enn for boks-potensialet, slik vi nettopp har sett. Mindre plass fører til høgare energi. Dei to eigenverdiane ϵ_{10} og ϵ_{20} har frå d) til e) auka med

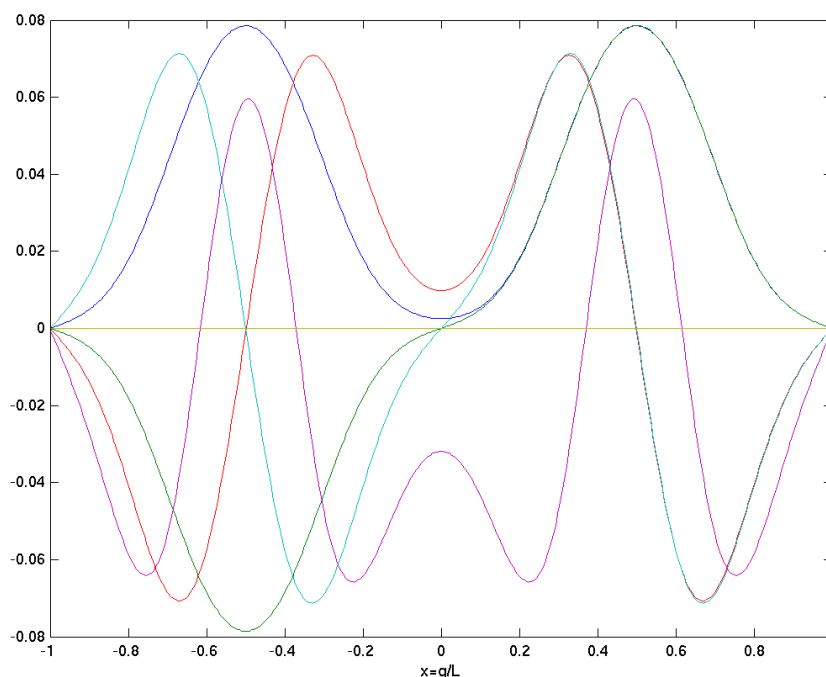
$$539.42 - 493.42 = 46.00 \quad \text{og} \quad 2018.2 - 1972.9 = 45.3,$$

som i begge tilfelle ligg svært nær den gjennomsnittlige auken av potensialet (som er $3v_0/2 = 45$). Moralen er at vi for store n like godt kan ‘jamne ut’ potensialet.

f) Vi kjøyrer så med $n_L = 2$, som svarer til to periodar av potensialet. Dei fire lågaste eigenverdiane er her

$$\epsilon_1 = 13.237, \quad \epsilon_2 = 13.259, \quad \epsilon_3 = 45.354 \quad \text{og} \quad \epsilon_4 = 45.634.$$

Vi merkar oss at dei to fyrste nesten fell saman med ϵ_1 -verdien frå førre punkt, medan dei to siste ligg nær ϵ_2 -verdien fra førre punkt.



Diagrammet viser dei fem fyrste eigenfunksjonane. Grunntilstanden er den symmetriske kurva utan nullpunkt (blå på min skjerm). Fyrste eksiterte tilstand ψ_2 er den antisymmetriske løysinga med eitt nullpunkt, på midten. Merk at om vi flyttar den harde veggen til origo, så har vi same potensial og same grensekrav som i e). Dette er grunnen til at eigenverdien ϵ_2 er nokså nøyaktig lik ϵ_1 i e). Tilsvarande er ϵ_4 nesten nøyaktig lik ϵ_2 i e). Tredje eksiterte tilstand, ψ_4 , er nemleg og antisymmetrisk, med eitt nullpunkt i origo, i tillegg til dei to andre, som ligg i $x = \pm 0.5$. Andre eksiterte tilstand, ψ_3 , er den symmetriske kurven med to nullpunkt. Grunnen til at det blir berre “nesten” her er at steglengda er forskjellig i dei to kjøyringane.

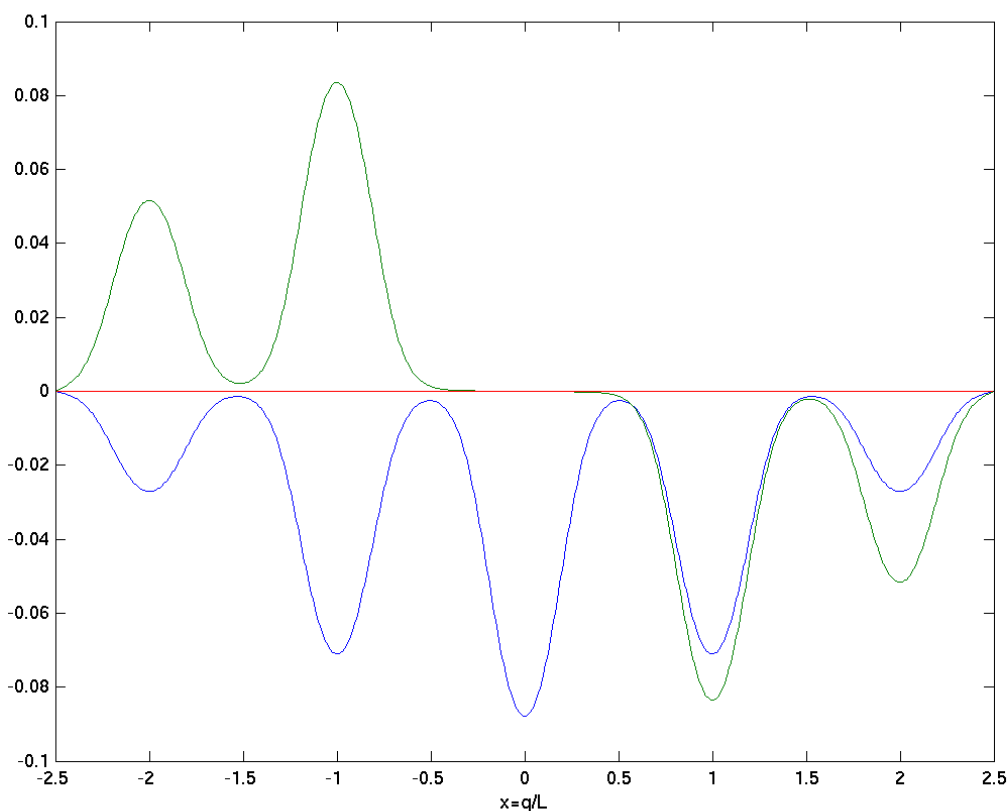
Vi har nå delvis forklart at eigenverdiane nesten fell saman. Men det gjenstår å forklare kvifor ψ_1 og ψ_2 får nesten like store energi, og tilsvarende for ψ_3 og ψ_4 . Forklaringa ligg i at potensialtoppen ved origo er klassisk forbode for dei lågaste energiane, slik at desse eigenfunksjonane krummar ganske sterkt bort frå aksen i dette området. Eigenverdien ϵ_2 er akkurat passe stor til at ψ_2 passerer origo og gjev ei antisymmetrisk løysing. Da treng ϵ_1 berre å vere ørlite grann mindre for at ψ_1 istadenfor å passere origo krummar oppover igjen og gjev ei symmetrisk løysing. Skilnaden mellom desse to energiane blir mindre jo større v_0 vi vel (dvs jo mindre gjennomtrengeleg barrieren i midten er). For ein helt ugjennomtrengeleg barriere degenererer dei to energiane til eitt nivå.

g) Med $n_L = 5$ (5 periodar av potensialet) ser vi at dei 10 lågaste eigenverdiene dannar to grupper:

$$\begin{aligned} \epsilon_1, \dots, \epsilon_5 &= 13.218, 13.229, 13.243, 13.254, 13.258, \\ &\text{og} \\ \epsilon_6, \dots, \epsilon_{10} &= 45.128, 45.263, 45.574, \dots, 45.628, \end{aligned}$$

medan $E_{11} = 80.487$. Talet på eigenverdiar i kvart av desse energibånda er altså lik talet på periodar i potensialet. Dette er karakteristisk for slike periodiske potensial, og er eit viktig poeng i faste stoffers fysikk.

Diagrammet nedanfor viser dei to første eigenfunksjonane.

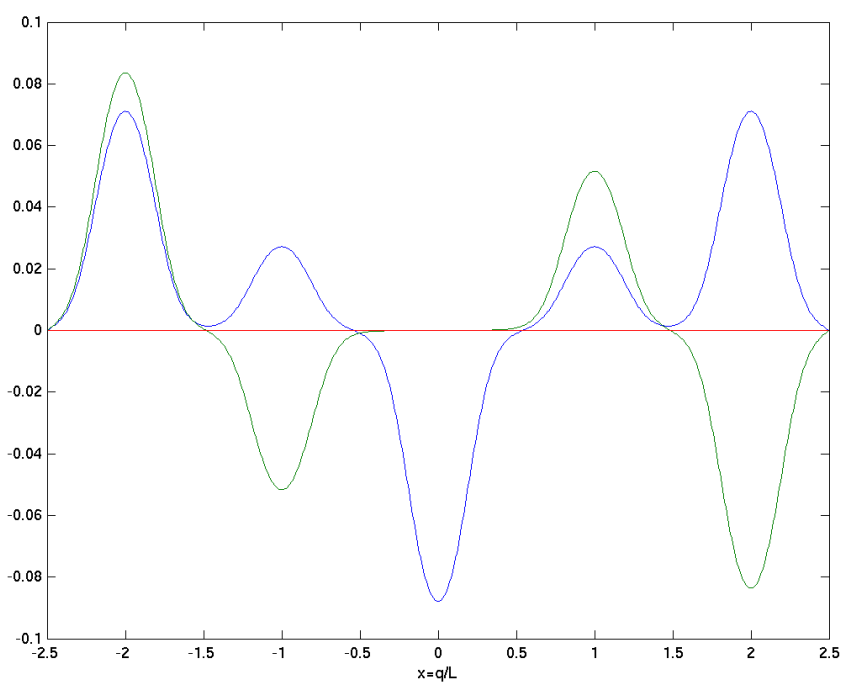


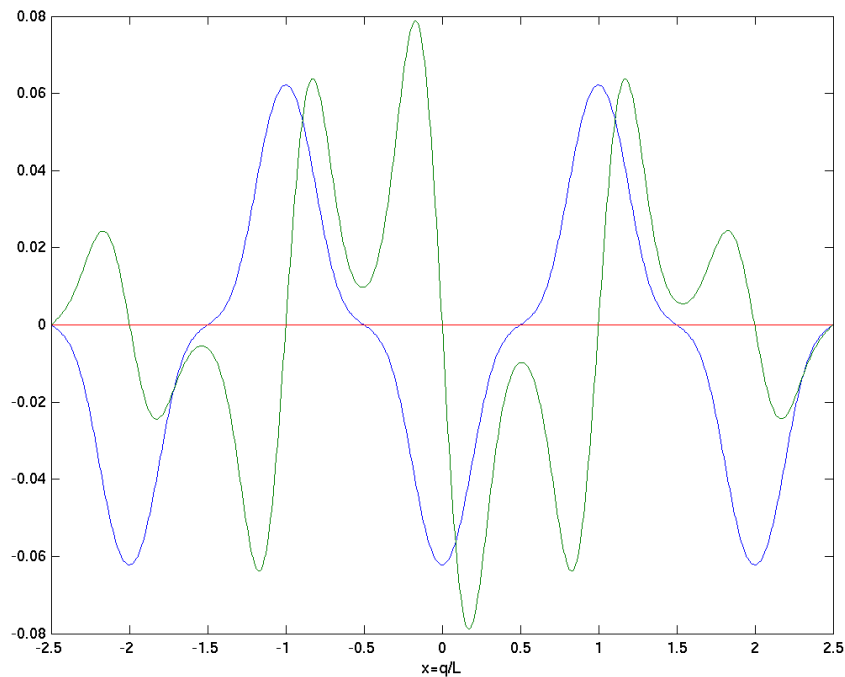
Desse kan vi skilje frå einannan vha antal nullpunkt, eller vha symmetri/antisymmetri. Grunntilstanden er som vanleg utan nullpunkt og er symmetrisk. Desse symmetrieegenska-

pane ser ut til å vere tilnærma oppfylde for dei numeriske løysingane. Eventuelle avvik kan ein sjekke nøyare ved å skrive ut verdien av ein eller flere av eigenfunksjonane i punkt som ligg symmetrisk plassert i forhold til origo. Slike eventuelle avvik skyldes unøyaktig numerikk.

Dersom ein skal studere problemet litt meir avansert numerisk vil ein prøve å byggje slike ting som symmetrieegenskapar inn som “føringar” på dei numeriske løysingane. Til dømes skal alle antisymmetriske løysingar vere lik null i origo. Då kunne vi ha nøyd oss med å løyse problemet for det “halve” potensialet.

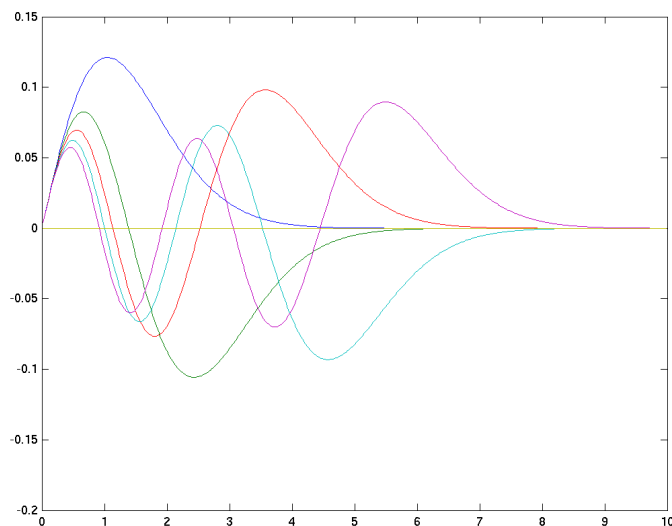
I dei neste diagramma ser vi ψ_3 og ψ_4 , respektive ψ_5 og ψ_6 . Legg spesielt merke til ψ_5 .



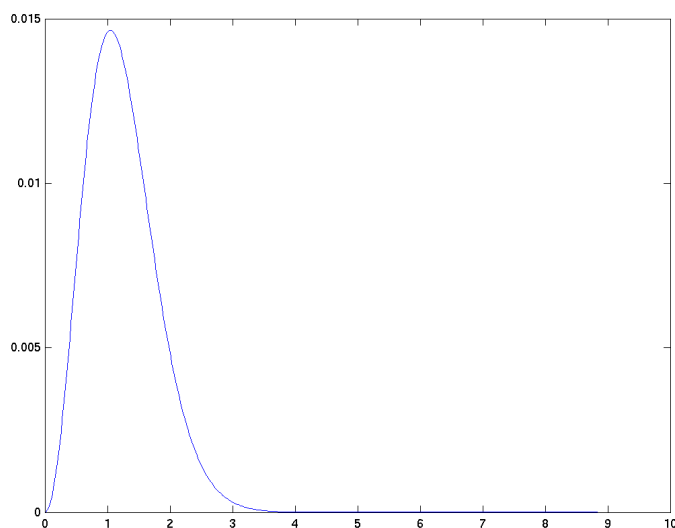


Løysing oppgåve 2 Numerisk løysing av den tidsuavhengige Schrödingerlikninga for partikkel i tyngdefelt

a) Ved å bruke potensial nr 6 i programmet finn vi at grunntilstanden har “energien” $\epsilon_1 = 1.8557$. Bølgjefunksjonen for dei fem første tilstandane ser slik ut:



Grunntilstanden $\psi_1(x)$ er løysinga utan nullpunkt for $x > 0$. Sannsynlegheitstettheiten $[\psi_1(x)]^2$ ser slik ut:



b) Frå diagrammet for $[\psi_1(x)]^2$ kan vi estimere at

$$\langle x \rangle \approx 1.3.$$

c) Med

$$(\Delta p_z)^2 = \langle p_z^2 \rangle = 2M \langle K \rangle \sim 2ME_1 \sim M \cdot Mg \langle z \rangle$$

har vi at

$$\Delta p_z \sim Mg^{1/2} \langle z \rangle^{1/2}.$$

Med $\Delta z \sim \langle z \rangle$ har vi då frå uskarpeitsrelasjonen:

$$\hbar \sim \Delta z \cdot \Delta p_z \sim \langle z \rangle \cdot Mg^{1/2} \langle z \rangle^{1/2} = \langle z \rangle^{3/2} Mg^{1/2},$$

slik at

$$\langle z \rangle \sim \left(\frac{\hbar^2}{M^2 g} \right)^{1/3}, \quad \text{q.e.d.}$$

Denne relasjonen fortel korleis $\langle z \rangle$ skalerer som funksjon av parametrane. Vi legg merke til at $\langle z \rangle$ går mot null i den “makroskopiske” grensa, $M \rightarrow \infty$. Ikkje uventa.

d) Med

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

er

$$\frac{d^2}{dz^2} = \frac{d^2}{d(ax)^2} = \frac{1}{a^2} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Ved å multiplisere den tidsuavhengige Schrödingerlikninga

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{2M}{\hbar^2} [Mgz - E] \psi$$

med $a^2/2$ har vi då

$$\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left[a^3 \cdot \frac{M^2g}{\hbar^2} x - \frac{a^2M}{\hbar^2} E \right] \psi.$$

Denne tar forma (2), $\frac{1}{2}\psi'' = [v(x) - \epsilon]\psi = [x - \epsilon]\psi$, når vi vel

$$a^3 \cdot \frac{M^2g}{\hbar^2} = f^3 \frac{\hbar^2}{M^2g} \cdot \frac{M^2g}{\hbar^2} = 1, \quad \text{dvs } f = 1.$$

Vi har då

$$\epsilon = \frac{a^2M}{\hbar^2} E, \quad \text{slik at } \frac{E}{Mg} = \frac{1}{a^2} \frac{\hbar^2}{M^2g} \epsilon = \epsilon \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3} \quad \text{og} \quad \frac{V}{Mg} = z = x \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3}.$$

For grunntilstandsenergien har vi såleis

$$\frac{E_1}{Mg} = 1.8557 \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3}.$$

Med $\langle x \rangle \approx 1.3$ blir det tilsvarende estimatet av $\langle z \rangle$ for grunntilstanden

$$\langle z \rangle_{\psi_1} \approx 1.3 \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3}.$$

e) For eit elektron i eit tyngdefelt med $g = 10 \text{ m/s}^2$ er den karakteristiske lengda

$$\left(\frac{\hbar^2}{m_e^2 g} \right)^{1/3} = \left(\left[\frac{\hbar}{m_e c} \right]^2 \frac{1}{g} \right)^{1/3} = \left([0.2682 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}]^2 \frac{1}{10 \text{ m/s}^2} \right)^{1/3} \approx 1.103 \text{ mm}.$$

f) Forventningsverdien kjem ut som

$$\langle x \rangle = \int x [\psi_1(x)]^2 dx \approx 1.2371,$$

ikkje langt unna estimatet ovanfor. Dette gjev

$$\frac{\langle K \rangle}{\langle V \rangle} = \frac{E_1 - \langle V \rangle}{\langle V \rangle} = \frac{\epsilon_1 - \langle x \rangle}{\langle x \rangle} = \frac{1.8557 - 1.2371}{1.2371} = 0.50004.$$

At resultatet er så nær 50 % er ikkje tilfeldig; sjå t.d. virialteoremet side 68 i boka til Hemmer.

g) Då forventningsverdien av z skal ha dimensjon lengde, må vi krevje at

$$[\langle z \rangle] = \text{m} = [M]^\alpha [g]^\beta [\hbar]^\gamma = \text{N}^{\alpha+\gamma} \text{m}^{\beta+\gamma-\alpha} \text{s}^{2\alpha-2\beta+\gamma}.$$

Løysinga er (i dette tilfellet eintydig) at

$$\alpha = -2/3, \quad \beta = -1/3 \quad \text{og} \quad \gamma = 2/3,$$

slik at vi må ha

$$\langle z \rangle = \text{konst} \cdot M^{-2/3} g^{-1/3} \hbar^{2/3} = \text{konst} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{M^2g} \right)^{1/3},$$

som stemmer overeins estimatet i c).