

LØSNING ØVING 7

Løsning oppgave 7 – 1 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

a. ♠ Alle leddene i (1) har selvsagt samme dimensjon. Ved å dividere ligningen med $\hbar\omega$ sikrer vi oss derfor at operatoren foran ψ (dvs $\hat{H}/\hbar\omega$) blir dimensjonsløs. Med

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

finner vi da at Schrödingerligningen (1) tar formen (2),

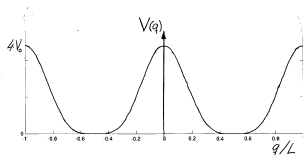
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x), \quad \left(\text{med } x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \right),$$

der

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

nå er hhvis det dimensjonsløse “potensialet” og den dimensjonsløse “energien”.

b.



♠ Med $q/L = x$ og divisjon av Schrödingerligningen med $\hbar^2/mL^2$ (som har dimensjon energi) finner vi at denne igjen tar formen (2), med

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

c. ♠ Vi går nå inn i programmet, setter $X_{\max} = 10$, og velger det harmoniske oscillator-”potensialet” $v(x) = \frac{1}{2}x^2$, dvs kommenterer bort bl.a det som har med potensialet ovenfor å gjøre. Vi kjører så etter tur med $N = 640, 320, 160$ og 80 . Resultatene for grunntilstanden er hhvis

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

altså avvik på hhvis

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

fra den eksakte verdien. Hvert av disse trinnene svarer til en firedobling av s^2 . Som en kontroll kan vi da regne ut 0.00003047 multiplisert med hhvis $1, 4, 16$ og 64 , som gir hhvis

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

Som vi må vente fra (3) og (4), vokser altså feilen proporsjonalt med kvadratet s^2 av “steplengden”.

♠ Teoretisk skal vi ha

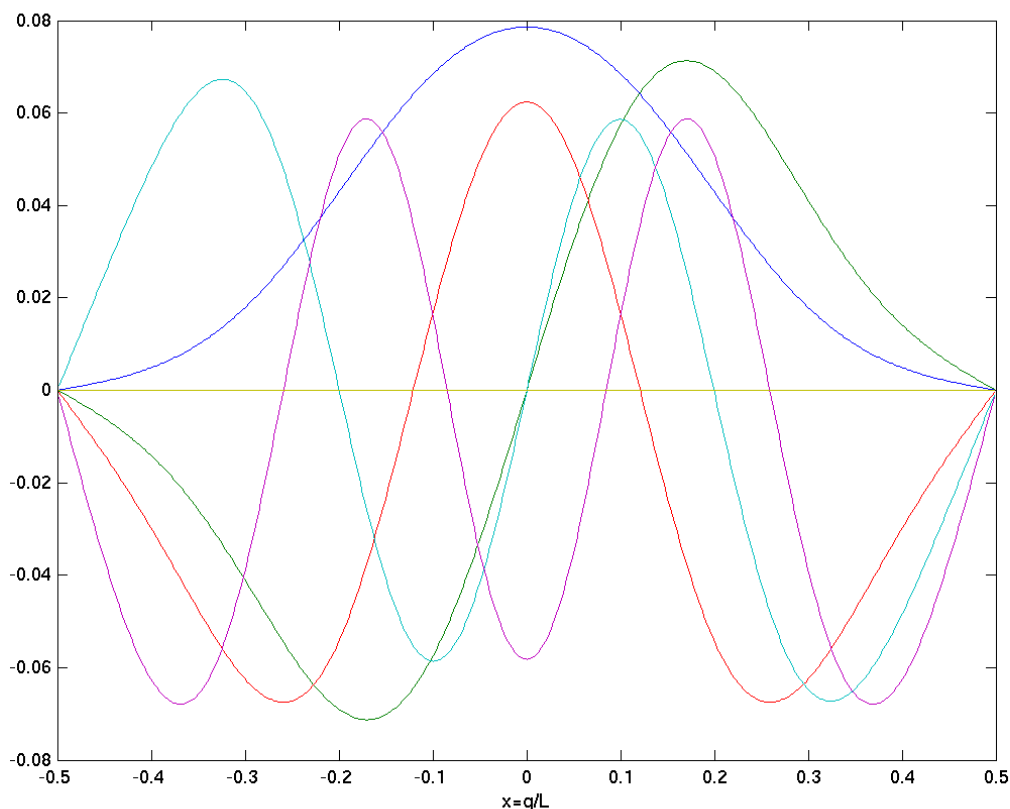
$$\epsilon_n = n - \frac{1}{2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Diagrammet for ϵ_n (for $N = 240$) viser en kurve som er noenlunde lineær opp til $n \sim 50$, men som avviker fra lineariteten for større n . Her er altså de numeriske resultatene feil. Forklaringen er at de klassiske vendepunktene, som teoretisk er bestemt av ligningen $V(q_{\pm}) = E_n$, dvs av $x_{\pm} = \pm\sqrt{2n+1}$, ligger utenfor intervallet $X_{\min} < x < X_{\max}$ for $n \gtrsim 50$, og da kan vi selvsagt ikke vente at resultatene blir gode.

d. ♠ Vi velger $N = 800$ og et boks-potensial med vidde L ($n_L = 1$). De teoretiske resultatene er da $2\epsilon_n/\pi^2 = n^2$. Numerisk finner vi for $n = 1, 2$ og 10 hhvis $0.9999987, 3.99998$, og 99.987 . Så her fungerer numerikken bra.

e. ♠ Fra potensial-diagrammet kan vi lese ut at de klassiske vendepunktene for $n = 1$ og 2 er hhvis

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



Dette harmonerer bra med de to kurvene for ψ_1 og ψ_2 (med hhvis 0 og 1 nullpunkt). Her ser vi tydelig at både ψ_1 og ψ_2 krummer *mot* akse i de klassisk tillatte områdene (mellom vendepunktene) og *bort fra* akse i de klassisk forbudte områdene. Merk at ψ_3, ψ_4 osv krummer *mot* akse i hele boksen (fordi $E - V$ for disse tilstandene er positiv over alt).

♠ For $n = 1$ og 2 merker vi oss at

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

Videre er

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

mens vi for den ordinære boksen hadde hhvis 1.00000 og 3.99998. Grunnen til økningen er selvsagt at potensialet her gir mye mindre klassisk tillatte områder enn for boks-potensialet, slik vi nettopp har sett. Mindre plass fører til høyere energi.

♠ De to egenverdiene ϵ_{10} og ϵ_{20} har fra pkt. d til pkt. e økt med hhvis

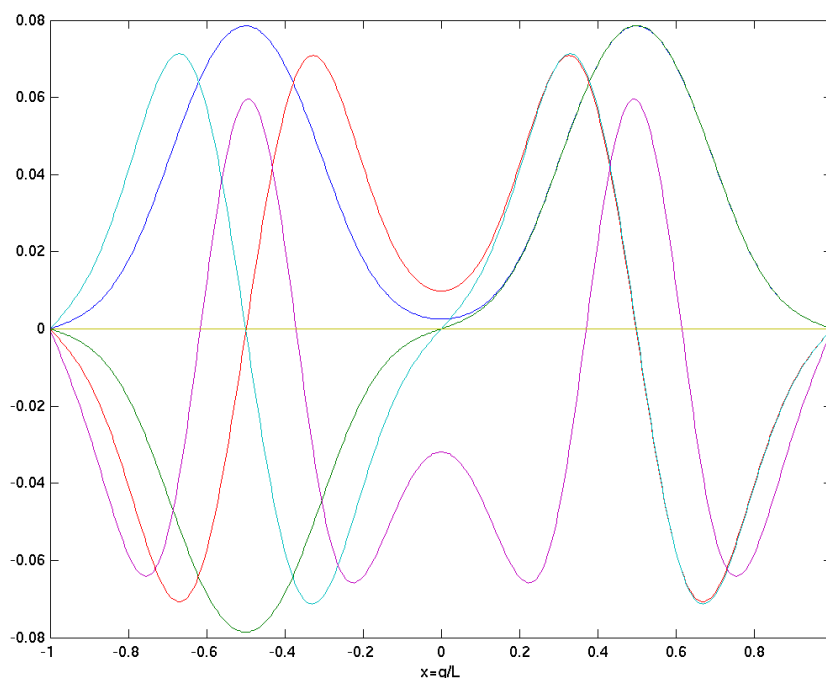
$$539.42 - 493.42 = 46.00 \quad \text{og} \quad 2018.2 - 1972.9 = 45.3,$$

som i begge tilfeller ligger svært nær den gjennomsnittlige økningen av potensialet (som er $3v_0/2 = 45$). Moralen er at vi for store n like godt kan “jevne ut” potensialet.

f. ♠ Vi kjører så med $n_L = 2$, som svarer til to perioder av potensialet. De fire laveste egenverdiene 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 merker oss at de to første nesten faller sammen med ϵ_1 -verdien fra forrige punkt, mens de to siste ligger nær ϵ_2 -verdien fra forrige punkt.



♠ Diagrammet viser de fem første egenfunksjonene. Grunntilstanden er den symmetriske kurven uten nullpunkter (blå på min skjerm). Første eksiterte tilstand ψ_2 er den antisymmetriske løsningen med ett nullpunkt, på midten. Merk at om vi flytter den harde veggen til origo, så har vi samme potensial og samme grensebetingelser som i pkt. e. Dette er grunnen til at egenverdien ϵ_2 er nokså nøyaktig lik ϵ_1 i pkt. e. Tilsvarende er ϵ_4 nesten nøyaktig lik ϵ_2 i pkt. e. Tredje eksiterte tilstand, ψ_4 , er nemlig også antisymmetrisk, med ett nullpunkt i origo, i tillegg til de to andre, som ligger i $x = \pm 0.5$. Andre eksiterte tilstand, ψ_3 , er den

symmetriske kurven med to nullpunkter. Grunnen til at det blir bare “nesten” her er at “step-lengden” er forskjellig i de to beregningene.

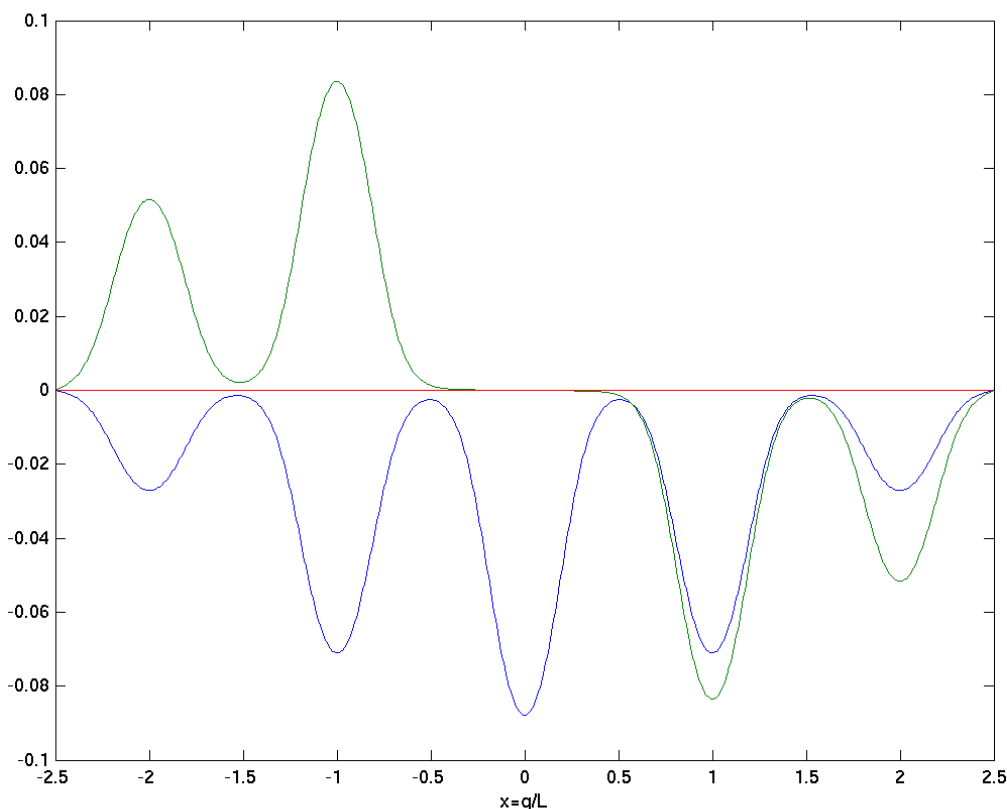
♠ Vi har nå delvis forklart nesten-sammenfallet av egenverdier. Men det gjenstår å forklare hvorfor ψ_1 og ψ_2 får nesten like store energier, og tilsvarende for ψ_3 og ψ_4 . Forklaringen ligger i at potensialtoppen ved origo er ganske så klassisk forbudt (for de laveste energiene), slik at disse egenfunksjonene krummer ganske sterkt bort fra akse i dette området. Egenverdien ϵ_2 er akkurat passe stor til at ψ_2 passerer origo og gir en antisymmetrisk løsning. Da trenger ϵ_1 bare å være ørlite grann mindre for at ψ_1 istedenfor å passere origo krummer oppover igjen og gir en symmetrisk løsning. Forskjellen mellom disse to energiene blir mindre jo større v_0 vi velger (dvs jo mindre gjennomtrengelig barrieren i midten er). For en helt ugjennomtrengelig barriere degenererer de to energiene til ett nivå.

g. ♠ Med $n_L = 5$ (5 perioder av potensialet) ser vi at de 10 laveste egenverdiene danner to grupper:

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

mens $E_{11} = 80.487$. Antallet egenverdier i hvert av disse “energibåndene” er altså lik antallet perioder i potensialet. Dette er karakteristisk for slike periodiske potensialer, og er et viktig poeng i faste stoffers fysikk.

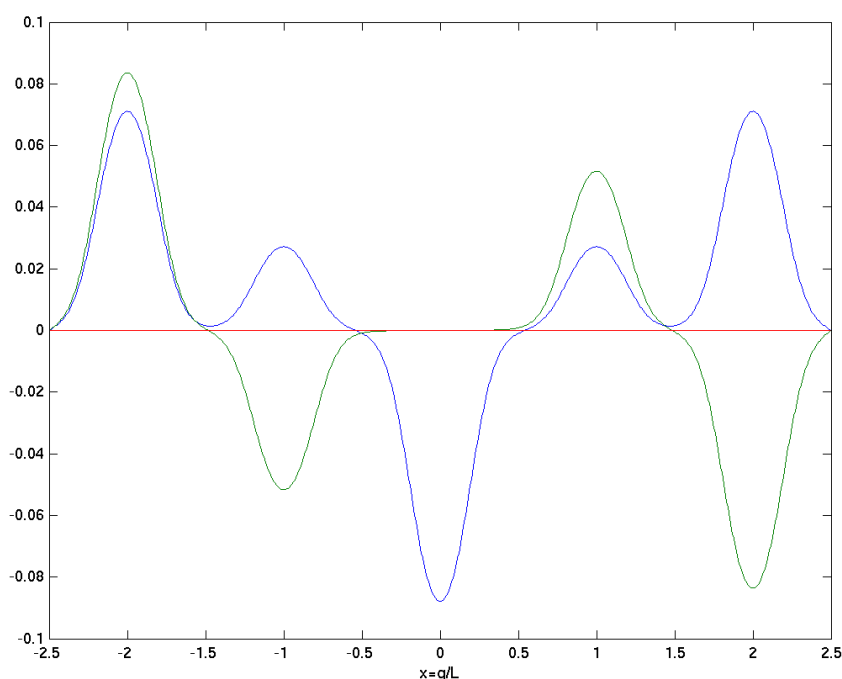
♠ Diagrammet nedenfor viser de to første egenfunksjonene.

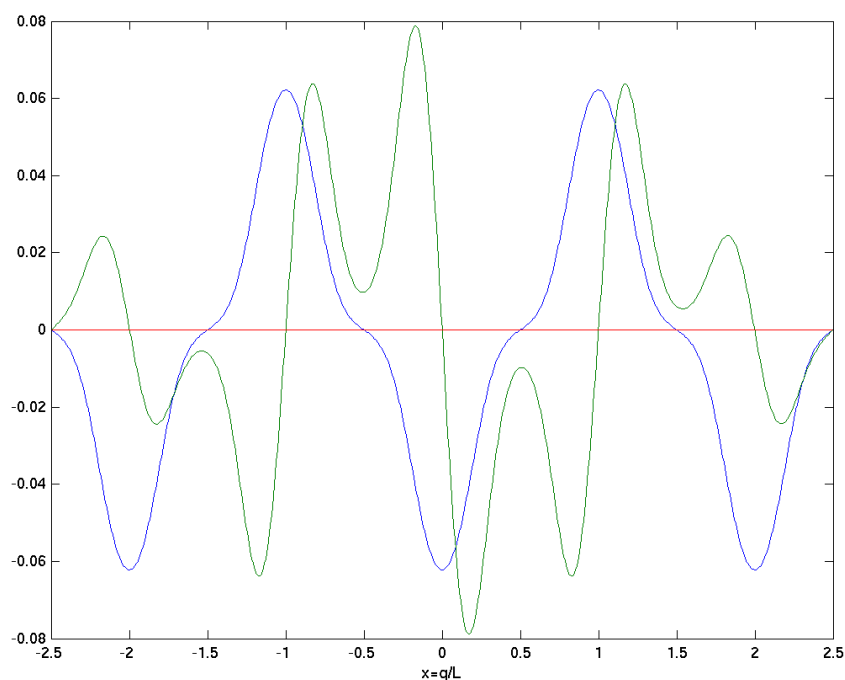


Disse kan vi holde fra hverandre vha antall nullpunkter, eller vha symmetri/antisymmetri. Grunntilstanden er som vanlig fri for nullpunkter og er symmetrisk. Disse symmetriegenskapene ser ut til å være tilnærmet oppfylt for de numeriske løsningene. Eventuelle avvik kan undersøkes nærmere ved f.eks å skrive ut verdien av en eller flere av egenfunksjonene i punkter som ligger symmetrisk plassert i forhold til origo. Slike eventuelle avvik skyldes numeriske unøyaktigheter.

I en mer avansert numerisk behandling av slike problemer vil en selvsagt etterstrebe å bygge slike ting som symmetriegenskaper inn som “føringer” på de numeriske løsningene. Som eksempel skal alle antisymmetriske løsninger være lik null i origo. Da kunne vi selvsagt ha nøyd oss med å løse problemet for det “halve” potensialet.

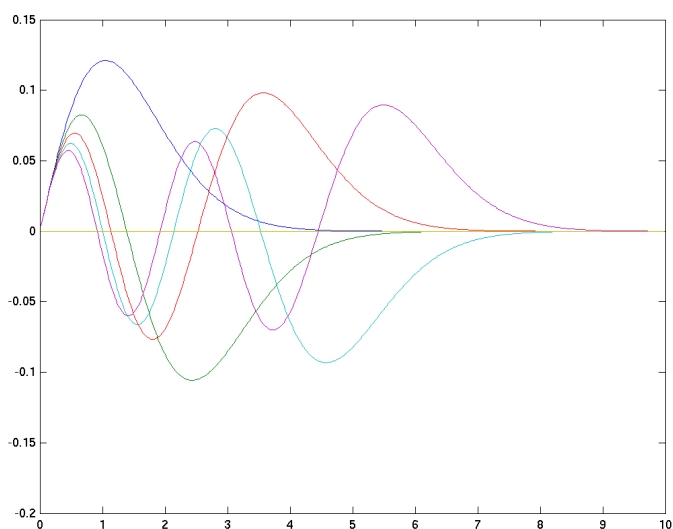
I de neste diagrammene vises ψ_3 og ψ_4 , respektive ψ_5 og ψ_6 . Legg spesielt merke til ψ_5 .



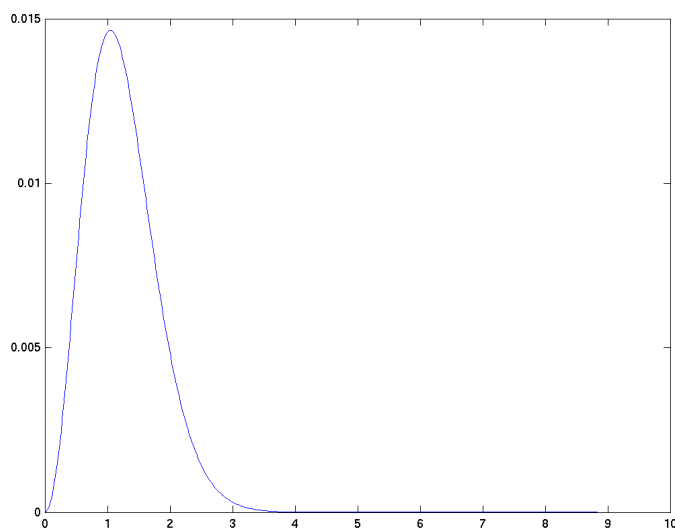


Løsning Oppgave 7 – 2 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen for partikkel i tyngdefelt

a. Ved å bruke potensial nr 6 i programmet finner vi at grunntilstanden har “energien” $\epsilon_1 = 1.8557$. Bølgefunksjonen for de fem første tilstandene ser slik ut:



Grunntilstanden $\psi_1(x)$ er løsningen uten nullpunkter for $x > 0$. Sannsynlighetstettheten $[\psi_1(x)]^2$ ser slik ut:



b. Fra diagrammet for $[\psi_1(x)]^2$ kan vi anslå 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 da fra uskarphetsrelasjonen:

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

slik at

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

Denne relasjonen forteller hvordan $\langle z \rangle$ skalerer som funksjon av de aktuelle parametrene. Vi legger merke til at $\langle z \rangle$ går mot null i den “makroskopiske” grensen, $M \rightarrow \infty$, ikke uventet.

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 Schrödingerligningen

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

med $a^2/2$ har vi da

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

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

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

Vi har da

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

For grunntilstandsenergien har vi dermed

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

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

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

e. For et elektron i et tyngdefelt med $g = 10 \text{ m/s}^2$ er den karakteristiske lengden

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

f. Forventningsverdien kommer ut som

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

ikke langt unna estimatet ovenfor. Dette skulle gi

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

At resultatet er så nær 50 % er ingen tilfeldighet; se f.eks virialteoremet side 68 i Hemmer.

g. Da forventningsverdien av z skal ha dimensjon lengde, må vi kreve at

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

Løsningen er (i dette tilfellet entydig) at

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

slik at vi må ha

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

i overensstemmelse med estimatet under pkt. **c**.