FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2015.
Løsningsforslag til øving 3.

Oppgave 1: Animasjon av ikke-stasjonære tilstander i endimensjonal potensialboks

I oppgave 1 i øving 2 studerte vi en ikke-stasjonær tilstand i en uendelig dyp potensialbrønn, satt sammen som en lineærkombinasjon av grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand. Ved tidspunktet $t = 0$ var partikkelens bølgefunksjon

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\frac{\pi x}{L} + \sin\frac{2\pi x}{L}\right).$$

De stasjonære løsningene har tidsavhengig faktor $\exp(-iE_n t/\hbar)$. Her er Ψ en sum av to stasjonære løsninger, med hhv $n = 1$ og $n = 2$, som betyr at

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\frac{\pi x}{L}e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin\frac{2\pi x}{L}e^{-iE_2 t/\hbar}\right),$$

med $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$. Sannsynlighetstettheten er $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$, og innsetting for $\Psi(x,t)$ gav

$$\rho(x,t) = \frac{1}{L}\left[\sin^2\frac{\pi x}{L} + \sin^2\frac{2\pi x}{L} + 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\cos\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}\right].$$

a) Uttrykket for $\rho(x,t)$ viser at sannsynlighetstettheten på et gitt sted varierer harmonisk med periode T. Skriv ned uttrykket for T. Anta at $\rho(x,t)$ beskriver et elektron i en boks med bredde $L = 100$ Å. Hvor stor blir da perioden T? Bruk enheten fs (femtosekunder).

For en gitt posisjon x er sannsynlighetstettheten på formen

$$\rho(t) = A + B\cos\frac{2\pi t}{T},$$

med periode

$$T = \frac{2mL^2\cdot 2\pi}{3\pi^2\hbar} = \frac{4mL^2}{3\pi\hbar}.$$

Med $L = 100\cdot 10^{-10} = 10^{-8}$ m og $m = 9.11\cdot 10^{-31}$ kg, samt $\hbar = 1.05\cdot 10^{-34}$ Js, blir perioden lik

$$T = \frac{4\cdot 9.11\cdot 10^{-31}\cdot 10^{-16}}{3\pi\cdot 1.05\cdot 10^{-34}} \simeq 3.68\cdot 10^{-13}\,\text{s} = 368\,\text{fs}.$$

b) Start opp *Enthought canopy* og åpne programmet oving3anim.py (som er lagt ut under mappen Python). Programmet er ferdig skrevet og kan kjøres som det er. "Prøvekjør" programmet for å sjekke at det fungerer som det skal: Hos meg kommer det opp en figur, med horisontal og vertikal akse mellom 0 og 10^{-8} og mellom 0 og 1, og med en blå kurve med "tyngdepunkt" som svinger fram og tilbake mellom ca 0.3 og 0.7. Animasjonen avsluttes ved å stenge figuren med krysset oppe i høyre hjørne.

Det er nødvendig å forstå (deler av) hva programmet gjør, da vi skal gjøre noen små endringer nedenfor. Vi går derfor gjennom programmet med noen kontrollspørsmål.

- Hva blir gjort i linje 6 – 8?

  Her tilordnes tallverdier for $\hbar$, elektronmassen m og boksbredden L.

- Hvilke verdier får energiene E_1 og E_2 i linje 9 og 10, og hva er enheten, når systemet er som beskrevet i *a*)?

  Energiverdier:

  $$E_1 \simeq 5.97 \cdot 10^{-22} \quad , \quad E_2 = 4E_1 \simeq 2.39 \cdot 10^{-21} \ldots$$

  Her brukes SI-enheter, dvs J (joule) for energier.

- I linje 13 – 14 opprettes de romlige bølgefunksjonene $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$. Er disse funksjonene normert?

  Nei, funksjonene $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ i programmet er ikke normert. Normering av disse (hver for seg) oppnås ved å gange med faktoren $\sqrt{2/L}$, som i dette tilfellet har tallverdien $\sqrt{2 \cdot 10^8} \simeq 14142$, i enheten $\mathrm{m}^{-1/2}$.

- Linjene 26 – 32 utgjør funksjonen animate(i), som kort fortalt returnerer grafen $y(x)$ for et gitt heltall i. I linje 37 – 38 sørges det for at $y(x)$ beregnes for i-verdier fra 1 til og med 368, der maksimalverdi for i angis med variabelen frames, og for hver i-verdi tegnes grafen $y(x)$ opp, med 10 ms, angitt med variabelen interval, mellom hvert bilde. En variabel kalt repeat har verdien True som *default* ("standard"), slik at serien på 368 bilder vises fram igjen og igjen, inntil figuren lukkes ved å klikke på krysset oppe i hjørnet. Hvor lang tid (klokketid, "real time") tar en serie på 368 bilder? Hvor lang tid tilsvarer dette "i elektronets verden"? Hvorfor har vi her valgt akkurat 368 bilder pr serie?

  Klokketid for en serie på 368 bilder: $368 \cdot 10$ ms $= 3.68$ s.

  I linje 27 setter vi t lik $i \cdot 10^{-15}$, som betyr at hvert bilde (hver i-verdi) tilsvarer 1 fs i elektronets verden. Serien på 368 bilder tilsvarer dermed 368 fs i "elektrontid".

  Med dette valget tilsvarer en serie på 368 bilder en hel periode for sannsynlighetstettheten $\rho(x,t)$. Dermed starter avspilling av neste periode hele tiden på "rett sted".

- I linje 30 utføres

  $$y = \frac{1}{4}\left|\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}\right|^2 .$$

  Dersom du kjører programmet, ser du at dette gir y-verdier mellom 0 og ca 0.8. Dersom y skulle tilsvare en normert $\Psi(x,t)$, hvilken tallfaktor skulle vi da egentlig hatt her (dvs, i stedet for 1/4)?

  Fra øving 2 vet vi at $\Psi(x,t)$ er normert med faktoren $1/\sqrt{L}$, som betyr at hvis y skal være lik en normert sannsynlighetstetthet $\rho(x,t)$, trenger vi faktoren $1/L$ i stedet for 1/4. Og i tallverdi er $1/L = 10^8$ m^{-1}.

c) Anta nå at elektronet befinner seg i en tilstand som er en lineærkombinasjon av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand, slik at bølgefunksjonen ved $t = 0$ er

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\frac{\pi x}{L} + \sin\frac{3\pi x}{L}\right).$$

Skriv ned $\Psi(x,t)$ for denne tilstanden, på tilsvarende vis som vi gjorde i innledningen til oppgaven, men med E_3 i stedet for E_2. Skriv også ned $\rho(x,t)$ for denne tilstanden, og vis at sannsynlighetstettheten nå vil variere harmonisk med t, men med en periode som er redusert med en faktor 3/8 i forhold til perioden i punkt *a*) og *b*).

Bølgefunksjonen:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\frac{\pi x}{L}e^{-iE_1t/\hbar} + \sin\frac{3\pi x}{L}e^{-iE_3t/\hbar}\right).$$

Sannsynlighetstettheten:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{L}\left[\sin^2\frac{\pi x}{L} + \sin^2\frac{3\pi x}{L} + 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{3\pi x}{L}\cos\frac{8\pi^2\hbar t}{2mL^2}\right].$$

Den tidsavhengige cosinus-faktoren har en frekvens som har økt med faktoren 8/3 sammenlignet med punktene *a*) og *b*), dvs perioden er redusert med faktoren 3/8.

d) Foreta de nødvendige endringene i oving3anim.py, slik at programmet lager en animasjon av $\rho(x,t)$ for lineærkombinasjonen av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand. Pass på å endre verdien av variabelen frames, slik at en hel serie også nå tilsvarer en hel periode. Dersom du ønsker at klokketid for animasjon av en hel periode skal være like lang som i *a*) og *b*), hva slags verdi vil du da velge for variabelen interval?

Nødvendige endringer i oving3anim.py:

- Linje 10: `E3 = (3*np.pi*hbar)**2/(2*m*L**2)`
- Linje 14: `psi3 = np.sin(3*np.pi*x/L)`
- Linje 29: `eksp3 = np.exp(-1j*E3*t/hbar)`
- Linje 30: `y = (1.0/4.0)*np.abs(psi1*eksp1+psi3*eksp3)**2`
- Linje 38: `frames=138, interval=27, blit=True)`

Siden frekvensen til $\rho(x,t)$ har økt med en faktor 8/3, må antall bilder i serien (frames) reduseres med faktoren 3/8, og 368*3/8 = 138. Ved å forlenge varigheten av hvert bilde (interval) med faktoren 8/3, fra 10 til (ca) 27 ms, blir klokketid for animasjon av en hel periode den samme som i *a*) og *b*).

Med utgangspunkt i to symmetriske tilstander er det vel ikke overraskende at absoluttkvadratet av lineærkombinasjonen av disse to, dvs $\rho(x,t)$, også må bli en symmetrisk funksjon.

Oppgave 2: Animasjon av bølgepakke sammensatt av mange stasjonære tilstander

Tilstandene i oppgave 1, satt sammen av kun to stasjonære tilstander, kan ikke sies å representere det vi tenker på som en "klassisk partikkel". Vi skal se at ved å lage en lineærkombinasjon av forholdsvis mange stasjonære tilstander, kan vi lage en bølgepakke som i en viss forstand oppfører seg som vi forventer av en klassisk partikkel.

Programmet oving3anim2.py lager en ikke-stasjonær tilstand (bølgepakke) som en lineærkombinasjon av 21 stasjonære tilstander, med energier fra og med $E_{110} = 110^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$ til og med $E_{130} = 130^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$. Med vektfunksjonen

$$W_n = \cos^2\left(\frac{(n-120)\pi}{22}\right)$$

gis de ulike stasjonære tilstandene vekt mellom 0 og 1, med vekt lik 1 for $n = 120$, og med symmetrisk avtagende vekt ned mot $n = 110$ og opp mot $n = 130$. Fasefaktoren

$$e^{-i(n-120)\pi/2}$$

sørger for at bølgepakken starter med sitt tyngdepunkt i $x = L/2$ ved $t = 0$, med (midlere) impuls og hastighet i positiv x-retning.

a) Kjør programmet slik det er lagt ut for å sjekke at det fungerer som det skal. Bølgepakken skal starte i retning mot høyre, kollidere med høyre vegg, reflekteres, kollidere med venstre vegg, og til slutt stanse med tyngdepunktet mellom $0.6L$ og $0.7L$.

Programmet fungerer forhåpentlig som beskrevet – det gjør det i hvert fall på min PC. Animasjonen stopper når toppen til bølgepakken er i posisjon $0.67L$. Med symmetrisk bølgepakke (omkring topp-punktet) er toppen sammenfallende med tyngdepunktet.

b) Målt i elektrontid, hvor lenge varer hvert bilde her? Og hvor lenge varer hele animasjonen? (Her har vi satt repeat=False, slik at animasjonen stopper etter en serie.) Hvor langt har elektronet, representert ved bølgepakkens tyngdepunkt, totalt beveget seg på denne tiden? Hva blir elektronets midlere hastighet (i absoluttverdi) i løpet av hele animasjonen? Hvilken midlere impuls tilsvarer denne midlere hastigheten? Hvilken midlere energi ($E = p^2/2m$) tilsvarer denne midlere impulsen? Sammenlign denne midlere energien med energien til de stasjonære tilstandene som bølgepakken er satt sammen av. Kommenter resultatet.

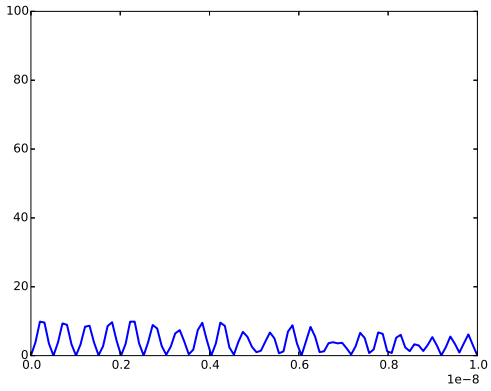
I linje 37 settes t lik `i*1E-18`, slik at hvert bilde tilsvarer 10^{-18} s i elektrontid. Det er i alt 5000 bilder (linje 50, frames), slik at hele animasjonen tilsvarer 5 fs i elektrontid. På denne tiden har bølgepakkens tyngdepunkt beveget seg i alt en lengde $2.17L$, og med $L = 100$ Å er dette 217 Å. Dette gir en midlere hastighet $217 \cdot 10^{-10}$ m / $5 \cdot 10^{-15}$ s = $4.34 \cdot 10^6$ m/s. Dette tilsvarer en midlere impuls $p = mv = 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 4.34 \cdot 10^6$ kg m/s = $3.95(374) \cdot 10^{-24}$ kg m/s, og en midlere energi $E = p^2/2m = mv^2/2 = 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (4.34 \cdot 10^6)^2/2$ J = $8.58 \cdot 10^{-18}$ J = 53.6 eV. La oss sammenligne dette med energien til den stasjonære tilstanden som tilsvarer $n = 120$:

$$E_{120} = 120^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 = 8.60 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 53.7 \text{ eV}.$$

Ikke urimelig, ettersom bølgepakken er en lineærkombinasjon av stasjonære tilstander "sentrert" omkring tilstanden med $n = 120$.

c) Følg elektronets bevegelse over et ti ganger så langt tidsrom ved å øke verdien på variabelen frames. (Endre eventuelt interval fra 5 til for eksempel 2, hvis du synes filmen går for langsomt.) Legg merke til hvordan bølgepakkens romlige usikkerhet $\langle x \rangle$ etter hvert blir større og større. Dette fenomenet kaller vi *dispersjon*, og det skyldes at de ulike energiene (frekvensene) som bølgepakken er satt sammen av, ikke har samme hastighet. Andre eksempler på bølger som oppviser dispersjon er overflatebølger på vann og elektromagnetiske bølger i et dielektrikum. Sistnevnte eksempel gir opphav til ulik grad av brytning for ulike farger i det synlige spektret, og fenomener som for eksempel regnbuen.

Bølgepakken sprer seg etter hvert utover. Mot slutten av animasjonen (som varer 50 fs i elektrontid) ser bølgepakken slik ut hos meg:



Ikke mye spor av den opprinnelige bølgepakken her.

Tips: Hvis du mener det er hensiktsmessig å inkludere "snapshots" fra de ulike animasjonene i besvarelsen din, er kanskje det enkleste å ta "print screen" underveis og kopiere dette inn i for eksempel programmet Paint med Ctrl+C. Der kan du lagre bildet i ønsket format.