FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2017.
Løsningsforslag til øving 3.

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

a) 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

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

b)

- 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 $1/L = 10^8\ \mathrm{m}^{-1}$.

c) 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) 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

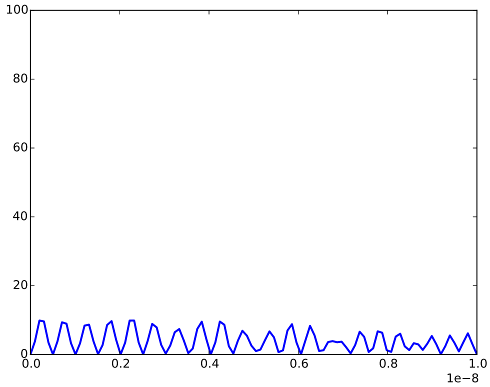
a) Programmet fungerer forhåpentlig som beskrevet – det gjør det i hvert fall på min PC. Animasjonen stopper når toppen til bølgepakken er i posisjon $0.67L$. Med symmetrisk bølgepakke (omkring topp-punktet) er toppen sammenfallende med tyngdepunktet.

b) 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 $n = 120$:

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

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

c) 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.