

## LØSNING ØVING 9

### Løsning oppgave 9 – 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  $\psi$  (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),

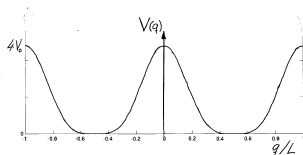
$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x), \quad \left( \text{med } x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \right),$$

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

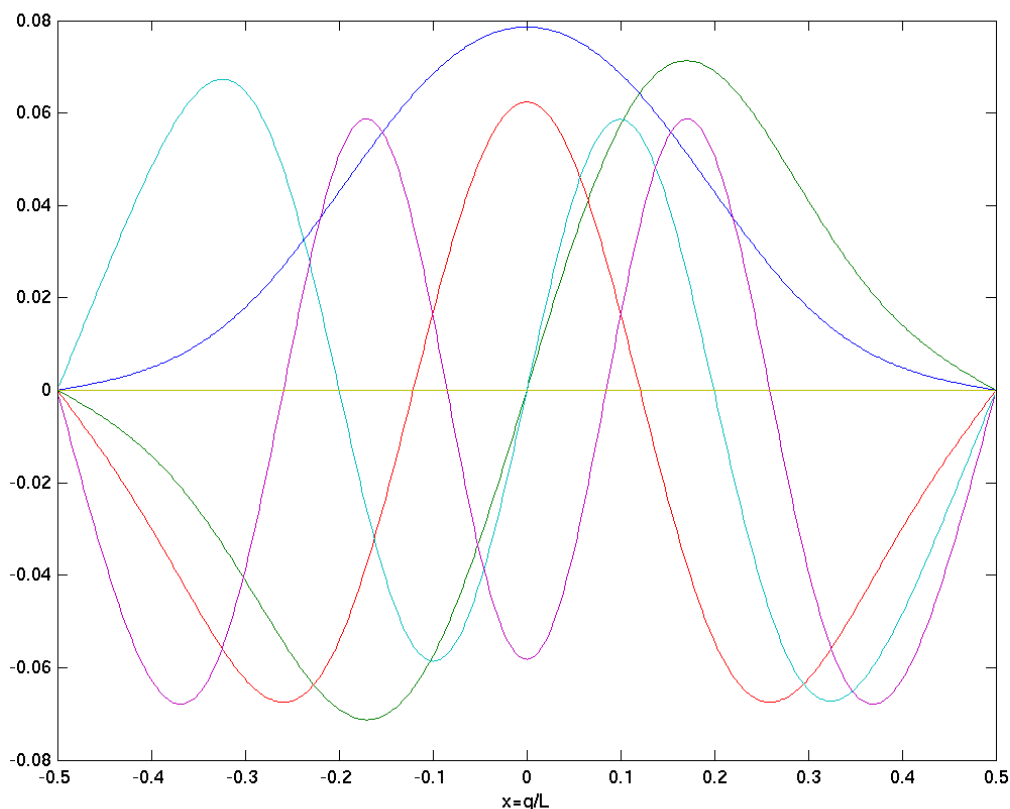
$$\epsilon_n = n - \frac{1}{2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Diagrammet for  $\epsilon_n$  (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  $\psi_1$  og  $\psi_2$  (med hhvis 0 og 1 nullpunkt). Her ser vi tydelig at både  $\psi_1$  og  $\psi_2$  krummer *mot* akse i de klassisk tillatte områdene (mellom vendepunktene) og *bort fra* akse i de klassisk forbudte områdene. Merk at  $\psi_3, \psi_4$  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  $\epsilon_{10}$  og  $\epsilon_{20}$  har fra pkt. d til pkt. e økt med hhvis

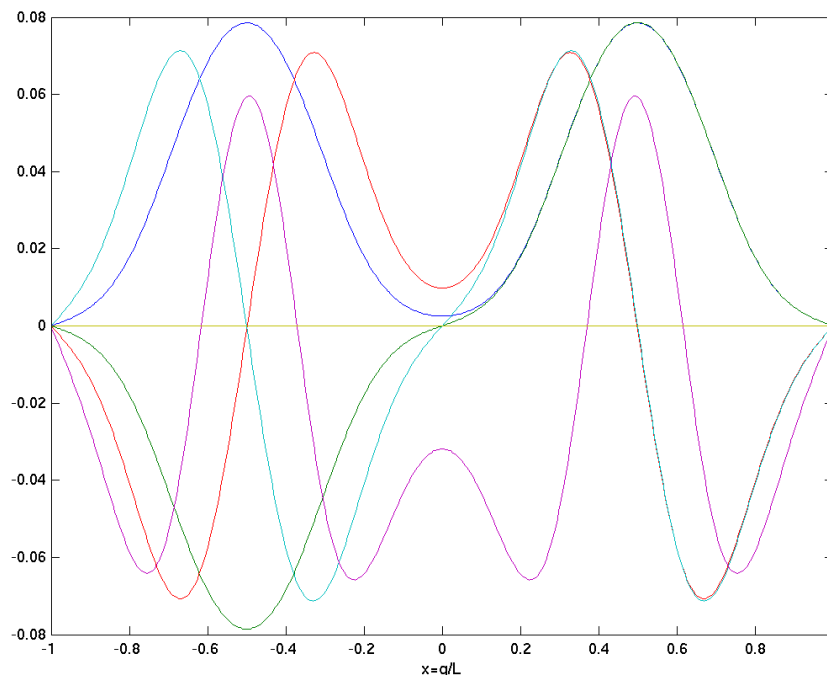
$$539.42 - 493.42 = 46.00 \quad \text{og} \quad 2018.2 - 1972.9 = 45.3,$$

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  $\epsilon_1$ -verdien fra forrige punkt, mens de to siste ligger nær  $\epsilon_2$ -verdien fra forrige punkt.



♠ Diagrammet viser de fem første egenfunksjonene. Grunntilstanden er den symmetriske kurven uten nullpunkter (blå på min skjerm). Første eksiterte tilstand  $\psi_2$  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  $\epsilon_2$  er nokså nøyaktig lik  $\epsilon_1$  i pkt. e. Tilsvarende er  $\epsilon_4$  nesten nøyaktig lik  $\epsilon_2$  i pkt. e. Tredje eksiterte tilstand,  $\psi_4$ , 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,  $\psi_3$ , 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.

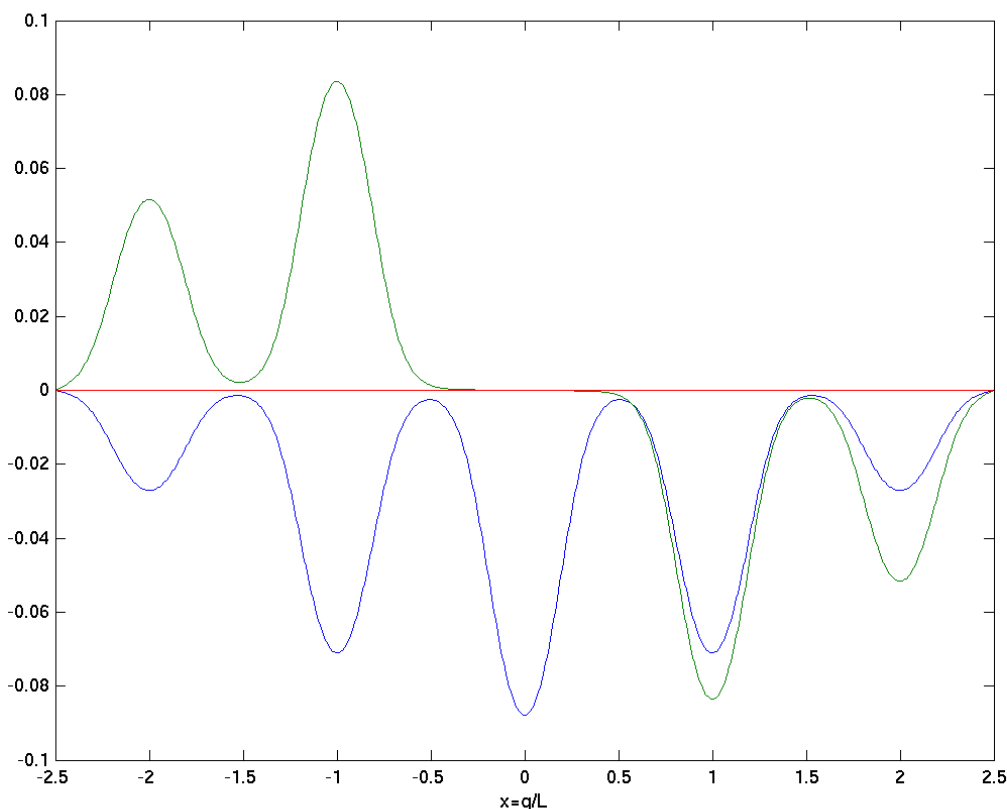
♠ Vi har nå delvis forklart nesten-sammenfallet av egenverdier. Men det gjenstår å forklare hvorfor  $\psi_1$  og  $\psi_2$  får nesten like store energier, og tilsvarende for  $\psi_3$  og  $\psi_4$ . Forklaringen ligger i at potensialtoppen ved origo er ganske så klassisk forbudt (for de laveste energiene), slik at disse egenfunksjonene krummer ganske sterkt bort fra akse i dette området. Egenverdien  $\epsilon_2$  er akkurat passe stor til at  $\psi_2$  passerer origo og gir en antisymmetrisk løsning. Da trenger  $\epsilon_1$  bare å være ørlite grann mindre for at  $\psi_1$  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.

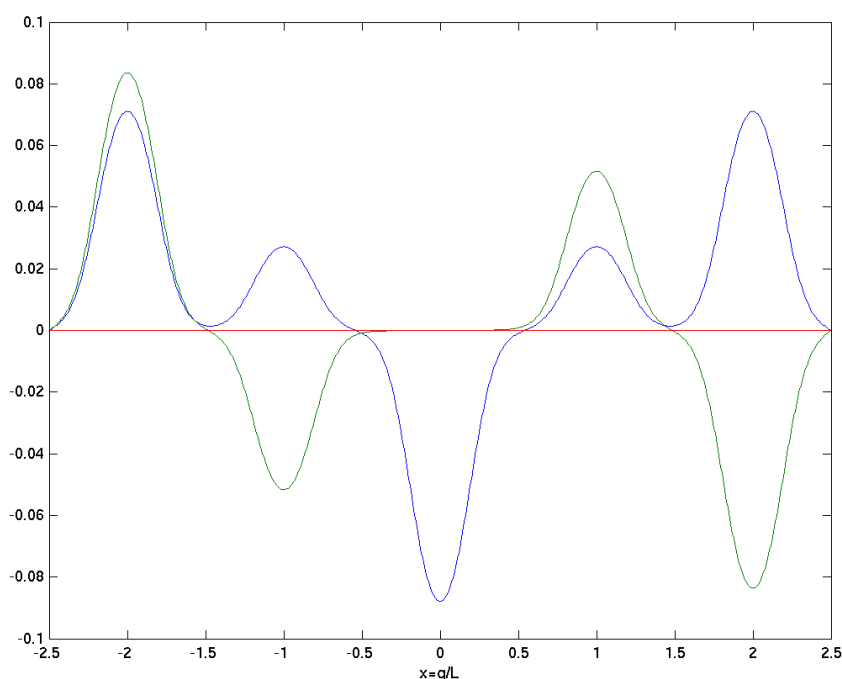
♠ Diagrammet nedenfor viser de to første egenfunksjonene.

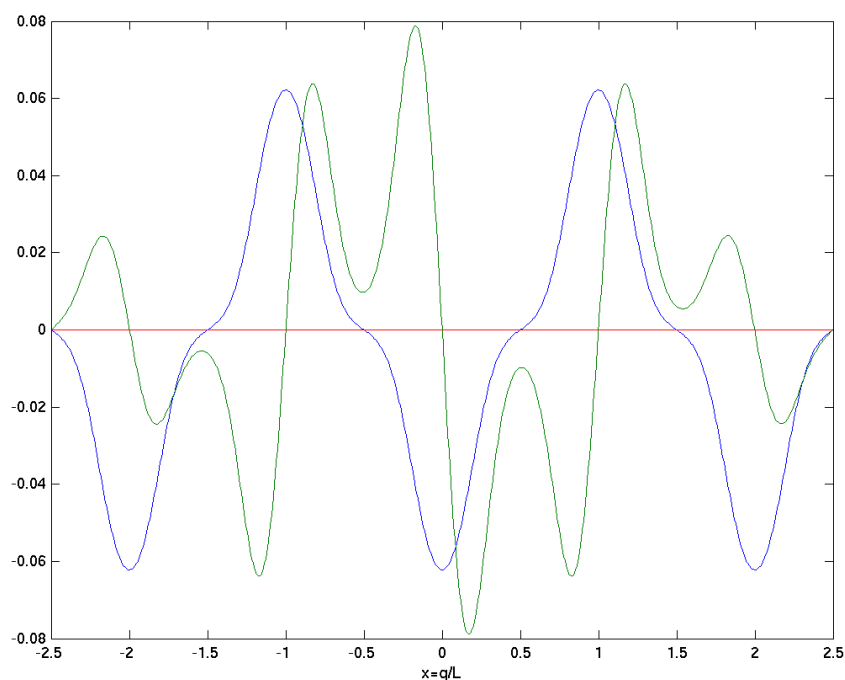


Disse kan vi holde fra hverandre vha antall nullpunkter, eller vha symmetri/antisymmetri. Grunntilstanden er som vanlig fri for nullpunkter og er symmetrisk. Disse symmetriegenskapene ser ut til å være tilnærmet oppfylt for de numeriske løsningene. Eventuelle avvik kan undersøkes nøyerere ved f.eks å 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.

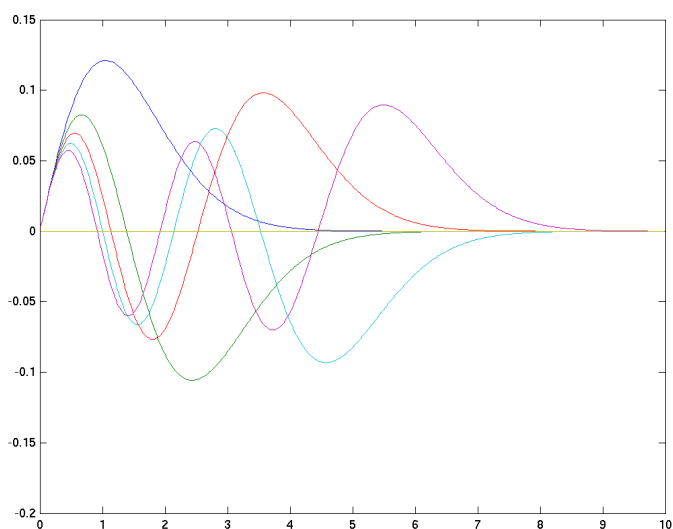
I de neste diagrammene vises  $\psi_3$  og  $\psi_4$ , respektive  $\psi_5$  og  $\psi_6$ . Legg spesielt merke til  $\psi_5$ .



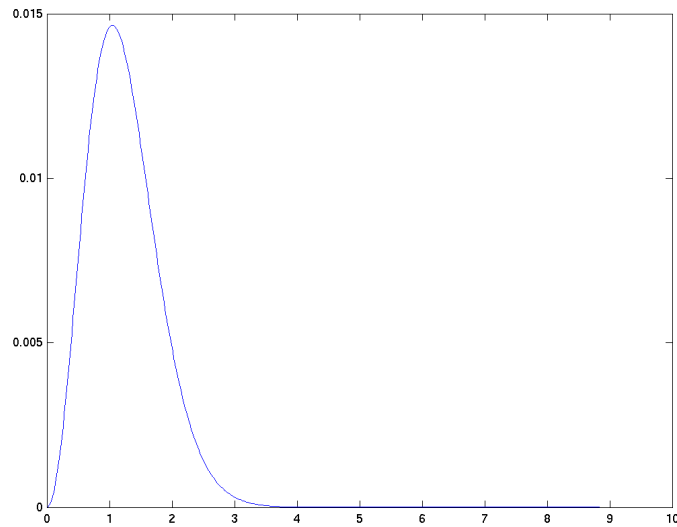


### Løsning Oppgave 9 – 2 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen for partikkel i tyngdefelt

**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**.