

NY frist for innlevering: 3. april kl 16

ØVING 10

Oppgave 24 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen

Innledning

I denne oppgaven skal vi bruke en numerisk metode til å bestemme energier og egenfunksjoner for bundne tilstander i et endimensjonalt potensial $V(q)$.

Oppgaven er et ledd i en prosess som er under oppstart ved instituttet, der vi tar sikte på å styrke studentenes (og lærernes) kompetanse når det gjelder bruk av simulering og andre redskaper innen anvendt matematikk, numerikk og IKT. Jeg anbefaler alle å gjøre denne oppgaven.

Oppgaven gjennomføres vha Matlab, eller like gjerne *octave*. Det er fint om dere kan programmere selv, men som en hjelp er det lagt ved et program til slutt i teksten.

Dimensjonsløse variable

La oss ta den endimensjonale harmoniske oscillatoren, med Schrödingerligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right] \psi = E \psi, \quad (1)$$

som et eksempel. Her vet vi at $\sqrt{\hbar/m\omega}$ har dimensjon lengde, og faktisk også er en *karakteristisk* lengde for oscillatoren. Da er det naturlig å innføre

$$x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}$$

som en dimensjonsløs koordinat. Ved å dividere (1) med $\hbar\omega$, finner vi da at den tar formen

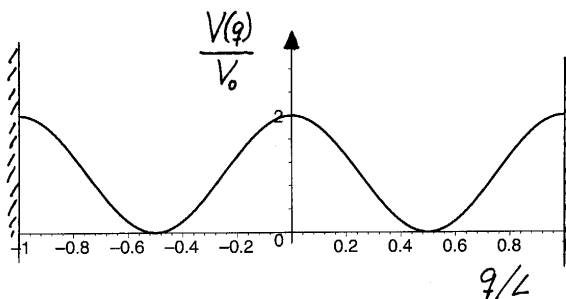
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi = \epsilon \psi. \quad (2)$$

a. •Gjennomfør dette, dvs utled (2) fra (1), og finn “potensialet” $v(x)$ uttrykt ved x , samt forbindelsen mellom den dimensjonsløse egenverdien ϵ og den virkelige energien E . [Som du sikkert skjønner, kan den tidsuavhengige Schrödingerligningen skrives på denne måten for alle endimensjonale potensialer $V(q)$, med passende definisjoner av x , $v(x)$ og ϵ .]

b. I denne oppgaven skal vi bl.a studere egenfunksjoner og spesielt energier for et litt spesielt bokspotensial, som ikke er glatt i bunnen, men har en kosinus-form med “bølgelengde” L . Vi lar boksen inneholde n_L perioder, slik at lengden er $n_L L$. Med origo i midten kan vi da for $-\frac{1}{2}n_L L < q < \frac{1}{2}n_L L$ sette

$$V(q) = V_0 \left(1 + \cos \left[\frac{2\pi}{L} \left(q + \frac{1}{2} n_L L \right) \right] \right).$$

Figuren viser $V(q)$ for en boks med $n_L = 2$ perioder:



•Innfør $q/L = x$, og finn $v(x)$ (uttrykt ved x og n_L) og ϵ i dette tilfellet. (Jf (1).)
 [Merk at $\hbar^2/mL^2$ har dimensjon energi. For $m = m_e$ og $L = 2a_0$, f.eks, er $\hbar^2/m_e L^2 = \frac{1}{2} \hbar^2/2m_e a_0^2 = \frac{1}{2} \cdot 13.6 \text{ eV}$.]

Diskretisering

Ved å Taylor-utvikle omkring x ,

$$\psi(x \pm s) = \psi(x) \pm s\psi'(x) + \frac{s^2}{2!}\psi''(x) \pm \frac{s^3}{3!}\psi'''(x) + \frac{s^4}{4!}\psi''''(x) + \dots,$$

ser vi at

$$\psi(x-s) - 2\psi(x) + \psi(x+s) = s^2\psi''(x) + \frac{s^4}{12}\psi''''(x) + \dots \quad (3)$$

For små s kan vi altså uttrykke $\psi''(x)$ ved verdiene av ψ i punktet x og de to nabopunktene $x \pm s$:

$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x-s) - 2\psi(x) + \psi(x+s)}{s^2}. \quad (4)$$

Vi vil nå prøve å løse ligning (2) numerisk, ved å diskretisere den dimensjonsløse variabelen x . Vi deler inn et intervall $x_{\min} < x < x_{\max}$ i N like store intervaller, med lengde

$$s = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N}.$$

I programmet (se nedenfor) er de diskrete x -verdiene

$$x_{\min}, x_{\min} + s, x_{\min} + 2s, \dots, x_{\max}$$

samlet i et array $x(1 : N + 1)$. Verdiene av ψ i disse punktene, som foreløpig er ukjente, kan vi tenke oss plassert i et array $\psi(1 : N + 1)$, og (de kjente) verdiene av potensialet $v(x)$ i de samme punktene plasserer vi i $V(1 : N + 1)$. Vi trenger også ψ'' i disse punktene. Vi antar at $x_{\min}$ og $x_{\max}$ velges slik at vi med god tilnærming kan sette $\psi(x_{\min} - s) = 0$ og $\psi(x_{\max} + s) = 0$. Da har vi (med tilnærmelsen (4))

$$\begin{aligned} \psi''(1) &= s^{-2}[0 - 2\psi(1) + \psi(2)] \\ \psi''(2) &= s^{-2}[\psi(1) - 2\psi(2) + \psi(3)] \\ &\vdots \\ \psi''(k) &= s^{-2}[\psi(k-1) - 2\psi(k) + \psi(k+1)] \\ &\vdots \\ \psi''(N+1) &= s^{-2}[\psi(N) - 2\psi(N+1) + 0]. \end{aligned} \quad (5)$$

Ligning (2) gir $N + 1$ ligninger:

$$-\frac{1}{2}\psi''(i) + V(i)\psi(i) = \epsilon\psi(i); \quad i = 1, 2, \dots, N + 1.$$

I disse ligningene setter vi nå inn fra (5). Med $e = -1/2s^2$ og

$$d(1 : N + 1) = V(1 : N + 1) + \frac{1}{s^2}$$

kan disse ligningene skrives på matriseform:

$$\begin{pmatrix} d_1 & e & & & \\ e & d_2 & e & & \\ & e & d_3 & e & \\ & & e & d_4 & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Her er alle elementene som ikke er skrevet opp i Hamilton-matrisen til venstre lik null. Denne tridiagonale matrisen kan diagonaliseres vha en (modal) matrise S :

$$S^{-1}HS = D. \quad (7)$$

Elementene i den diagonale matrisen D er da egenverdiene ϵ_n ($n = 1, \dots, N + 1$) til Hamilton-matrisen H . Søylene i transformasjonsmatrisen S er de tilhørende egenfunksjonene, $\psi_n(1 : N + 1)$. Merk at dette systemet tilsvarer grensebetingelsene

$$\psi(x_{\min} - s) = \psi(x_{\max} + s) = 0. \quad (8)$$

c. •Velg harmonisk oscillator-potensial, ved å fjerne ett kommentartegn “%”. Sett $X_{\max} = 10$ og finn grunntilstandsenergien ved å regne med N lik henholdsvis, 480, 240, 120 og 60. Påvis at feilen i de numeriske resultatene er proporsjonal med s^2 , slik vi måtte vente ut fra (3) og (4).

Når programmet kjøres (f.eks for $N=240$), kommer det ut bl.a et diagram som viser ϵ_n som funksjon av n . •Hvordan skal denne kurven oppføre seg teoretisk? •Hvorfor avviker de numeriske resultatene ganske mye fra de teoretiske, unntatt for forholdsvis små n ? [Hint: Se på grensebetingelsene i forhold til de teoretiske klassiske vendepunktene.]

d. Bruk så $N = 500$. For en ordinær boks med lengde L kan vi bruke $x = q/L$ som dimensjonsløs posisjonsvariabel. Her husker vi fra (8) at grensebetingelsene er

$$\psi(q = \pm L) = \psi(x = x_{\min} - s) = \psi(x_{\max} + s) = 0.$$

Lengden L av boksen svarer altså til $N + 2$ intervaller med lengde s , slik at $(N + 2)s = 1$, og slik at du i programmet kan sette

$$X_{\max} = -X_{\min} = \frac{1}{2}Ns = \frac{1}{2}\frac{N}{N + 2}.$$

•Gjør dette, og sammenlign resultatene for ϵ_n med de teoretiske, som er

$$\epsilon_n = \frac{E_n}{\hbar^2/mL^2} = \frac{1}{2}\pi^2 n^2.$$

[Hint: Skriv ut $2\epsilon_n/\pi^2$ f.eks for $n=1,2$ og 10.]

e. Velg nå potensial nummer 5 i programmet (beskrevet i pkt. b.), slik at potensialet inne i “boksen” er

$$v(x) = v_0 \left(1 + \cos \left[2\pi \left(x + \frac{1}{2} n_L \right) \right] \right).$$

•Prøv først med $n_L = 1$, som svarer til én periode av kosinusen. Velg v_0 lik ca 30. I den ene figuren som skrives ut finner du $v(x)$ og de ti laveste egenverdiene ϵ_n . •Les ut de klassiske vendepunktene for $n = 1$ og $n = 2$, og sjekk om de to bølgefunksjonene ψ_1 og ψ_2 krummer slik de skal. •Skriv ned verdiene til ϵ_1 og ϵ_2 . •Print også ut $2\epsilon_1/\pi^2$ og $2\epsilon_2/\pi^2$ og sammenlign med de tilsvarende verdiene under pkt. d. Hvorfor blir ϵ_1 og ϵ_2 større her enn i pkt. d? •Sjekk hvor mye ϵ_9 og ϵ_{10} har økt fra pkt. d til pkt. e, og sammenlign økningen med gjennomsnittet av $1 + \cos(2\pi(x - n_L/2))$.

f. Prøv så med $n_L = 2$ (dvs med dobbelt så stor vidde, slik at det blir plass til 2 perioder av kosinusen). •Skriv ned de fire laveste egenverdiene, og sammenlign med resultatene fra forrige punkt. •Ta ut et diagram som viser de tilsvarende egenfunksjonene, merk av hva som er hva, og legg dette ved besvarelsen. •Hvordan kan det ha seg at egenverdiene her blir parvis nesten sammenfallende, og også nesten er de samme som med én periode?

g. •Sett $n_L = 5$, og skriv ned de 10 laveste egenverdiene. Poenget her er at disse egenverdiene samler seg i “bånd”, med energigap imellom. Vi ser her begynnelsen av trekk som er typiske for periodiske potensialer, som oppleves f.eks av ledningselektronene i et metall. Mer om dette i faste stoffers fysikk og i TFY4205 Kvantemekanikk.

•Ta ut et diagram som viser de 5 første egenfunksjonene, og marker hva som er hva. Ser du noe tegn til numeriske unøyaktigheter?

h. •Dersom du føler for det, kan du bruke programmet på et potensial som du selv velger. Har du videre *forslag* til problemstillinger som du synes kunne være interessante å ta opp senere, så tar vi gjerne imot slike.

```
% One-dimensional confining potential,
% solved through matrix diagonalization
% hbar = m = 1
    close; close; close; % removes plots from previous run

% Number of grid points: N+1
N = 500; %number of steps between Xmin and Xmax
% Range (symmetric; wavefunction is zero outside this range):
Xmax = 10; Xmin = -Xmax; % if potential number 1,2,3
% If Potential number 4 (box potential), choose nL (length =nL*L)
%
% If potential number 5 (box potential with sinusoidal
% bottom), also choose amplitude of the cosine (v0):
%
% v0 = 30; nL=5; Xmin=-(nL/2.0)*N/(N+2); Xmax=-Xmin;
```

```

% Step size:
dx = (Xmax - Xmin)/N;
% Position x is array with values Xmin, Xmin+dx, ... , Xmax:
x = (Xmin):dx:(Xmax);

% Choose type of potential by removing one commenting % sign:

% potential number 1: Harmonic oscillator:
% V = 0.5*x.^2;
% potential number 2: Symmetric double well:
% V = 0.01*x.^4-0.5*x.^2+6.25;
% potential number 3: V-shaped potential:
% V = abs(x);
% potential number 4: Ordinary box (use nL=1 above):
% V=0.00*x;
%
% Potential number 5: Box potential with sinusoidal bottom;
% amplitude of the cosine is v0; number of periods of the cosine is nL:
% V = v0*(1+cos(2*pi*(x+nL/2)));
%
% Diagonal elements
d = 1/dx^2+V;
% Off-diagonal elements
e = -1/(2*dx^2);
% Setting up the Hamiltonian matrix, first diagonal terms:
H = diag(d);
% Next, include off-diagonal elements:
H(2:(N+1),1:N) = diag(e*ones(1,N)) + H(2:(N+1),1:N);
H(1:N,2:N+1) = diag(e*ones(1,N)) + H(1:N,2:N+1);
% Diagonalizing the matrix solves the Schrödinger equation.
% The command [S,D] = eig(H) produces matrices of eigenvalues (D) and
% eigenvectors (S) of matrix H, so that H*S = S*D. Matrix D is the
% canonical form of H - a diagonal matrix with H's eigenvalues on
% the main diagonal. Matrix S is the modal matrix - its columns are
% the eigenvectors of H:
[S,D] = eig(H);
% We store the eigenvalues in the array "eigenvalues":
eigenvalues = diag(D);
% Plot wavefunction for lowest eigenvalue (n = 1):
n = 1;
% plot(x,(S(:,n)')));
% Plot absolute square of wavefunction nr n:
% plot(x,(S(:,n)')).^2);
% To display several wavefunctions in one plot:
figure;
zero=0.0*zeros(1,N+1);
plot(x,(S(:,1)')),x,(S(:,2)')),x,(S(:,3)')),x,(S(:,4)')),x,(S(:,5)')),x,zero);

```

```

%title('First five eigenfunctions');
%xlabel('x=q/L');

% print -dpng fig42159-10-3.png % creates png-file
% To display several wavefunctions squared in one plot:
% plot(x,(S(:,1'))).^2,x,(S(:,2'))).^2,x,(S(:,3'))).^2,x,(S(:,4'))).^2);
% Plot the potential V(x) in a new figure:
% First make arrays for each of the eigenvalues:
e1=eigenvalues(1)*ones(1,N+1);
e2=eigenvalues(2)*ones(1,N+1);
e3=eigenvalues(3)*ones(1,N+1);
e4=eigenvalues(4)*ones(1,N+1);
e5=eigenvalues(5)*ones(1,N+1);
e6=eigenvalues(6)*ones(1,N+1);
e7=eigenvalues(7)*ones(1,N+1);
e8=eigenvalues(8)*ones(1,N+1);
e9=eigenvalues(9)*ones(1,N+1);
e10=eigenvalues(10)*ones(1,N+1);

% figure; %plot potential alone
% plot(x,V);
% xlabel('q/L')
% ylabel('V/V_0')
% print -dpng name.png

figure; % plot of v(x) and the first 10 eigenvalues:
plot(x,V,x,e1,x,e2,x,e3,x,e4,x,e5,x,e6,x,e7,x,e8,x,e9,x,e10);

% Plot the eigenvalues in a new figure:
figure;
plot(eigenvalues);

% print (to screen) the first ten eigenvalues:
eigenvalues(1),eigenvalues(2),eigenvalues(3),eigenvalues(4),eigenvalues(5),
eigenvalues(6),eigenvalues(7),eigenvalues(8),eigenvalues(9),eigenvalues(10)

% print eigenvalues* 2/pi^2, relevant for box:
eigenvalues(1)*2/pi^2,eigenvalues(2)*2/pi^2,eigenvalues(10)*2/pi^2

%-----END OF PROGRAM

```