

LØSNING ØVING 10

Løsning oppgave 24 Numerisk løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen

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),

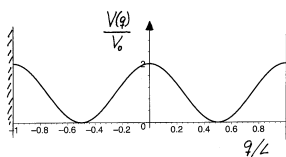
$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x), \quad \left(\text{med } x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \right),$$

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

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

c. • Vi går nå inn i programmet, velger $X_{\max} = 10$, og etter tur $N = 480, 240, 120$ og 60 , 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. Resultatene for grunntilstanden er hhvis

$$\epsilon_1 = 0.49995, 0.49978, 0.49913 \text{ og } 0.49650,$$

altså avvik på hhvis

$$0.00005, 0.00022, 0.00087 \text{ og } 0.00350$$

fra den eksakte verdien. Hvert av disse trinnene svarer til en firedobling av s^2 . Som en kontroll kan vi da regne ut 0.0000547 multiplisert med hhvis $1, 4, 16$ og 64 , som gir hhvis

$$0.0000547, 0.000219, 0.00087 \text{ og } 0.00350.$$

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 $N = 500$ 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 1.00000, 3.9999, og 99.967. Så her fungerer numerikken bra.

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

$$x_{\pm} \approx \pm 0.18 \quad \text{og} \quad x_{\pm} \approx \pm 0.35.$$

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 $E - V$ her er positiv).

- For $n = 1$ og 2 merker vi oss at

$$\epsilon_1 = 15.973 \quad \text{og} \quad \epsilon_2 = 46.079.$$

Videre er

$$2\epsilon_1/\pi^2 = 3.2368 \quad \text{og} \quad 2\epsilon_2/\pi^2 = 9.3375,$$

mens vi for den ordinære boksen hadde hhvis 1.00000 og 3.9999. Grunnen til økningen er selvsagt at kosinus-potensialet gir mye mindre klassisk tillatte områder, slik vi nettopp har sett. Mindre plass fører til høyere energi.

- De to egenverdiene ϵ_9 og ϵ_{10} har fra pkt. **d** til pkt. **e** økt med hhvis

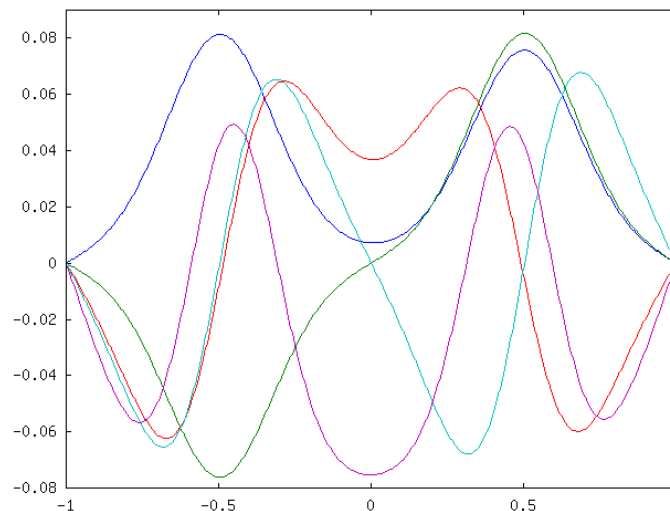
$$429.90 - 399.61 = 30.29 \quad \text{og} \quad 523.55 - 493.32 = 30.23,$$

som i begge tilfeller ligger svært nær den gjennomsnittlige økningen av potensialet ($v_0 = 30$). Moralen er at vi for store n like godt kan jevne ut kosinusen, slik at $v(x) = v_0$.

f. • Vi kjører så med $n_L = 2$, som svarer til to perioder av kosinusen. De fire laveste egenverdiene er her

$$\epsilon_1 = 15.854, \quad \epsilon_2 = 15.973, \quad \epsilon_3 = 43.963 \quad \text{og} \quad \epsilon_4 = 46.077.$$

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 nøyaktig lik ϵ_1 i pkt. e. Tilsvarende er ϵ_4 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.

•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 den midterste toppen av kosinusen 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 kosinusen) ser vi at de 10 laveste egenverdiene danner to grupper:

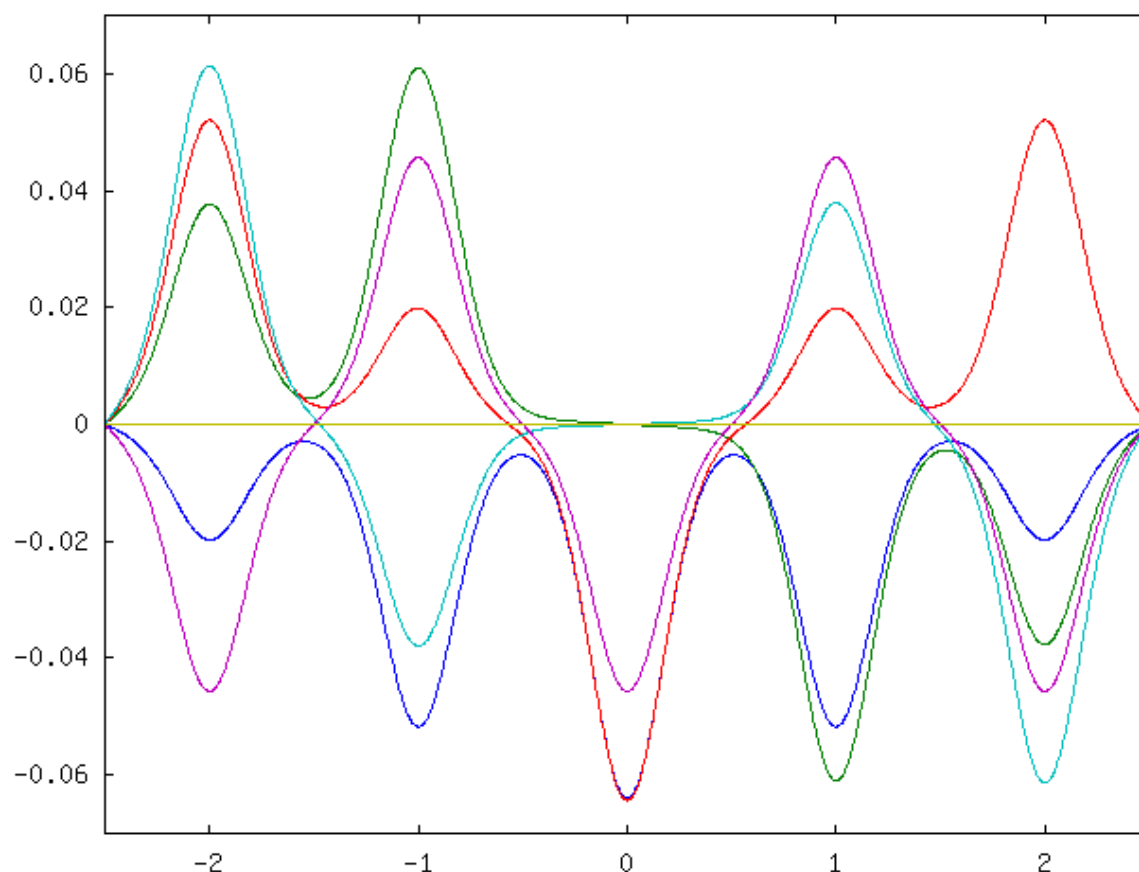
$$\epsilon_1, \dots, \epsilon_5 = 15.758, 15.816, 15.888, 15.947, 15.970$$

og

$$\epsilon_6, \dots, \epsilon_{10} = 42.681, 43.437, 44.522, 45.590, 46.067.$$

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 på neste side viser de fem første egenfunksjonene.



Disse kan vi holde fra hverandre vha antall nullpunkter. Grunntilstanden er som vanlig fri for nullpunkter og er symmetrisk. Første eksiterte skal være antisymmetrisk med ett nullpunkt, osv. Disse symmetriegenskapene ser ut til å være tilnærmet oppfylt for de numeriske løsningene. Eventuelle avvik kan undersøkes nøyere 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.