Kollokvium 7
Enda mer Python kvantemekanikk

5. mars 2015

Dette er det siste kollokviet viet til `Python`. Som i forrige `Python`-kollokvium så anbefaller at så mange som mulig tar med seg laptop. Vi minner også om programmeringskompediet og samlingen med eksempler:
`http://www.uio.no/studier/emner/matnat/fys/FYS2140/v15/programmering/programmeringskompendium.pdf`
`http://www.uio.no/studier/emner/matnat/fys/FYS2140/v15/programmering/programmering.html`

Målet med dette kollokviet er at du skal kunne lage et skript som løser Schrödingerligningen numerisk for en gitt intialtilstand, og forstå litt om hva slags begrensninger metoden din har.

Utgangspunktet for de numeriske simuleringer vi skal gjøre er at Schrödingerligningen

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi, \tag{1}$$

kan skrives på følgende form som er mer anvendelig for numerisk løsning:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - i\frac{V}{\hbar}\Psi. \tag{2}$$

Fra denne kan vi finne bølgefunksjonen ved tiden $t+\Delta t$, $\Psi(x, t+\Delta t)$, dersom vi kjenner den ved tiden t, ved å bruke

$$\begin{aligned}\Psi(x, t + \Delta t) &= \Psi(x, t) + \Delta t\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} \\ &= \Psi(x, t) - \Delta t\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(x, t).\end{aligned} \tag{3}$$

Flere detaljer, og metoder for å gjøre dette, er beskrevet i programmeringskompendiet.

Tenk nøye gjennom hva slags enheter alle konstantene har, og hva slags verdier de kan ha for at du skal kunne få meningsfylte svar. Vi vil foreslå at du bruker lengder på picometer (pm) nivå og tidssteg mye mindre enn ett attosekund (as). Vi minner om at $\hbar c = 0.1973$ MeV pm og $c = 3.0 \times 10^2$ pm/as.

Oppgave 1 Enda mer Python

a) Plot sannsynlighetsfordelingen for følgende initialtilstand (husk enheter på aksene):

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2g^3}{\pi}}\frac{1}{(x - x_0)^2 + g^2}e^{ikx}. \tag{4}$$

Her er x_0, g og k tre reelle konstanter som du kan velge selv. Dette kalles for en **Lorentz bølgepakke**. Hva er det konstantene x_0 og g bestemmer?

b) Løs Schrödingerligningen numerisk for initialtilstanden i **a)** med potensialet $V(x) = 0$. Du har fritt valg av metode. Hva er det egentlig konstanten k styrer? *Hint:* Prøv å forandre fortegn på k.

c) Kompendiet viser flere metoder, noen er mer robuste enn andre. Hva slags begrensninger har metoden du har valgt? Hvor store verdier kan du for eksempel bruke mellom hvert tidssteg i animasjonen før metoden bryter sammen? Har det noe med hvor lenge animasjonen går, eller hva slags verdier konstantene har?

d) Lek deg litt med å endre intialtilstanden til noe annet.

e) Forsøk så å introduser et (boks)potensial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{hvis } a < x < 2a, \\ 0 & \text{ellers,} \end{cases} \tag{5}$$

der $V_0 > 0$ og a er to konstanter du igjen kan velge fritt. La bølgepakken begynne til venstre for potensialet og undersøk hva som skjer når den når frem og hvordan dette avhenger av V_0, a og de andre konstantene. Forsøk gjerne med andre potensialformer også.