

Kollokvium 7
Enda mer Python kvantemekanikk

4. mars 2014

Dette er det siste kollokviet viet til Python. Som i tidligere Python-kollokvium så anbefaller at så mange som mulig tar med seg laptop, og at de som ikke har anledning til det finner seg noen å jobbe sammen med. Vi minner også om programmeringskompediet og samlingen med eksempler:

http://www.uio.no/studier/emner/matnat/fys/FYS2140/v14/data/comp_v1.pdf

<http://www.uio.no/studier/emner/matnat/fys/FYS2140/v14/data/data.html>

Målet med dette kollokviet er at du skal kunne lage et skript som løser Schrödingerligningen numerisk for en gitt initialtilstand, og forstå litt om hva slags begrensninger metoden din har. Vi minner om at man kan skrive Schrödingerligningen på følgende form som er mer anvendelig for numerisk løsning:

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \Psi(x, t) - \Delta t \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(x, t). \quad (1)$$

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

Opgave 1 Enda mer Python

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

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{1}{2\pi b^2} \right)^{1/4} e^{-(x-x_0)^2/4b^2} e^{ikx}. \quad (2)$$

Her er x_0 , b og k tre reelle konstanter som du kan velge selv. Dette kalles for en **gausisk bølgepakke**. Hva er det konstantene x_0 og b 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) Hva slags begrensninger har metoden din? 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 initialtilstanden til noe annet.
- e) Forsøk så å introduser et (boks)potensial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{hvis } a < x < 2a, \\ 0 & \text{ellers,} \end{cases} \quad (3)$$

der $V_0 > 0$ og a er to konstanter du igjen kan velge fritt. La den gausiske 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.