

Skilaverkefni 1, uppfært 8. sept 2011

Kennarar: Ólafur Jónasson, Viðar Guðmundsson

Seinasti skiladagur: 12/9

1 (10 stig)

a)

Búðu til fall sem gerir það sama og matlab fallið `linspace`. Til dæmis á `linspace(0.0,1.0,3)` að skila vigrinum `[0.0, 0.5, 1.0]`. Hafðu fallið innan í module þannig hægt sé að nota það í aðalforriti með USE. Beinagrind af module og aðalforriti (fyrir a og b lið) er hægt að nálgast á <http://notendur.hi.is/olj5/tolvued1/V1/>.

b)

Búðu til fall sem reiknar fasa (e. argument) tvinntölu. Fasa tvinntölu $z = x + iy$ er hægt að reikna skv.

$$\theta = \arg(z) \equiv \begin{cases} \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{ef } x > 0 \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \pi & \text{ef } x < 0 \text{ og } y \geq 0 \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) - \pi & \text{ef } x < 0 \text{ og } y < 0 \\ \frac{\pi}{2} & \text{ef } x = 0 \text{ og } y > 0 \\ -\frac{\pi}{2} & \text{ef } x = 0 \text{ og } y < 0 \\ \text{óskilgr.} & \text{ef } x = 0 \text{ og } y = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Til er innbyggt fall í ifort og gfortran sem reiknar $\arg(z)$. Það nefnist `ATAN2` og dæmi um notgun á því er $\theta = \text{ATAN2}(y, x)$ þar sem x er raunhluti z og y er tvinnhlutinn. Berið saman fallið ykkar við `ATAN2`.

2 (10 stig)

Ef $\psi_n(x)$ eru eiginföll einhvers Hamilton virkja er hægt að reikna tímaþróun bylgjufalls með

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2)$$

þar sem

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad (3)$$

er bylgjufallið á tíma $t = 0$ og E_n er orka eiginástands $\psi_n(x)$.

Notaðu þessa upplýsingar til að reikna $\Psi(x, t)$ fyrir eind í óendanlega djúpum mættisbrunni með breidd L og byrjunarástandið

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(x) + \psi_2(x) + \psi_3(x) \} . \quad (4)$$

Athugið að fyrir óendanlega djúpan mættisbrunn gildir

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} . \quad (5)$$

Reiknaðu $\Psi(x, t)$ fyrir 10-1000 gildi á t . Reiknaðu síðan líkindadreifinguna $|\Psi(x, t)|^2$ og fasa bylgjufallsins $\text{Arg}[\Psi(x, t)]$ og settu niðurstöðurnar fram á gröfum. Veldu gildin á t skynsamlega.

Notaðu einingarlausar stærðir í útreikningum og gröfum. Skynsamlegt er að nota $\tilde{x} \equiv x/L$, $\tilde{E}_n \equiv E_n \frac{2mL^2}{\hbar^2}$ og $\tilde{t} \equiv tE_1/\hbar$.