Skilaverkefni 2, uppfært 10/9

Kennarar: Ólafur Jónasson, Viðar Guðmundsson

Seinasti skiladagur: 26/9

Schrödinger jafnan leyst í fallagrunni

Hamiltonvirkja eindar í óendanlega djúpum mættisbrunni með breidd a er hægt að skrifa sem

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0 \ , \tag{1}$$

þar sem m er massi eindarinnar og V_0 er mætti sem hægt er að skrifa í raunrúmi (e. coordinate representation) sem

$$V_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } 0 < x < a \\ \infty & \text{annars .} \end{cases} \tag{2}$$

Það ættu allir að kannast við eiginföll H_0, en þau eru

$$\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \ n \in \mathbb{N}^+ \tag{3}$$

og tilsvarandi orkugildi $\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL}$.

Skilgreinum nú annan Hamilton virkja $H = H_0 + W$ þar sem

$$W(x) = \begin{cases} W_0 & \text{ef } |x - a/2| < b/2 \\ 0 & \text{annars} \end{cases} \ . \tag{4}$$

þar sem $b < a$ og $W_0 > 0$. Hæfileg stærð á b er $a/10$. Við sjáum að W skilgreinir mættisvegg með hæð W_0 og breidd b sem er staðsettur í miðjum mættisbruninum $V(x)$.

Verkefnið þitt er að leysa tímaóháðu Shrödinger jöfnuna $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$, þ.e. finna eiginástönd H og orku þeirra. Eiginföll H erfitt að reikna analýtískt (en þó hægt). Þú átt aftur á móti að leysa verkefnið með að nota línulegan fallagrunn. Skoðaðu hvernig stærð W_0 hefur áhrif á orkuróf og bylgjuföll kerfisins. Skoðaðu einnig samleitni orkurófsins með tilliti til stærð grunnsins.

Leiðbeiningar

Það fyrsta sem þú þarft að gera er að velja grunn. Grunnurinn $\{|\phi_n\rangle\}$ er tilvalinn. Vigrana í þessum grunni er hægt að rita sem

$$|\phi_n\rangle = \begin{bmatrix} c_1^{(n)} \\ c_2^{(n)} \\ \vdots \\ c_\infty^{(n)} \end{bmatrix}_\phi \tag{5}$$

þar sem $c_m^{(n)} = \delta_{mn}$. Athugið að vigrarnir í $\{|\phi_n\rangle\}$ mynda hornréttan og staðlaðan grunn fyrir Hilbert rúmið sem við erum að vinna í. Það er því hægt að rita hvaða vigur í þessu Hilbert rúmi sem línulega samantekt af stökum í $\{|\phi_n\rangle\}$.

Í ofangreindum grunni er hægt að skrifa H sem

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1\infty} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2\infty} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{\infty 1} & H_{\infty 2} & \cdots & H_{\infty\infty} \end{bmatrix}_\phi , \tag{6}$$

þar sem fylkjastök H eru reiknuð skv.

$$H_{mn} = \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | H_0 + W | \phi_n \rangle \ . \tag{7}$$

Augljóslega er H óendanlega stórt. Þú þarft því að skera af grunninum, þ.e. þú þarft að setja $\infty \to N$. Stærðin á N ákvarðar því hversu mörg föll þú notar í fallagrunnin og þar með nákvæmninni í útreikningum þínum. Eftir skurð hefur fylkið H því stærðina $N \times N$.

Eftir að vera búinn að reikna öll N^2 fylkjastök H þarftu að hornalínugera fylkið. Þetta gerir þú með að nota undirstef (e. subroutine) úr MKL safninu sem fylgir ifort þýðandanum. Betur er farið í notkun þess í fyrirlestrum. Undirstefið skilar fylkinu U þar sem dálkar U eru eiginvigrar H, eða

$$U = [|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_N\rangle] \ . \tag{8}$$

þar sem

$$|\psi_i\rangle = \begin{bmatrix} c_1^{(i)} \\ c_2^{(i)} \\ \vdots \\ c_N^{(i)} \end{bmatrix}_\phi \ . \tag{9}$$

Undirstefið skilar einnig vigrinum $\mathbf{E}$ sem inniheldur orku eiginástandanna $|\psi_i\rangle$,

$$\mathbf{E} = [E_1, E_2, ..., E_N] \ . \tag{10}$$

Að lokum getur þú reiknað eiginföll H í raunrúminu skv.

$$\psi_i(x) = \langle x|\psi_i\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n^{(i)} \phi_n(x) \ . \tag{11}$$

Nánari nótur um notgun fallagruns er hægt að nálgast í http://hartree.raunvis.hi.is/~vidar/Nam/LikonM/lik_inng.pdf