Laboration[1]

Laborationen är frivillig och genomförs utan särskild handledning. Godkänd redovisning ger bonus 20% beräknat på poängen för Godkänt vid första tentamenstillfället i oktober (och endast då).

Avsikten är att belysa sambandet mellan kurserna Matematiska Metoder och Fysik,[2] genom att behandla egenvärdesproblemet för den tidsoberoende Schrödinger-ekvationen i tre rumsdimensioner dels i rätvinkliga koordinater och dels i polära koordinater ($\mathbf{r} = (x, y, z),\ r = ||\mathbf{r}||, \nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$):

$$\left(-\hbar^2/(2m)\,\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r})$$

för potentialen $V(\mathbf{r}) = Kr^2/2$ – "harmoniska oscillatorn". Detta motsvarar egenvärdesproblemet vi behandlar i kursen

$$Au = \lambda u$$

där en symmetrisk matris A svarar mot operatorn $-\hbar^2/(2m)\,\nabla^2 + V(\mathbf{r})$; egenvektorn u svarar mot egenfunktionen $u(\mathbf{r})$; egenvärdet λ svarar mot energi-egenvärdet E. Schrödinger-ekvationen approximeras av en sådan matrisekvation vid en diskretisering, t. ex. om derivator byts mot differenser som i kursboken, avsnitt 1.7. I båda fallen utgör egenfunktionerna resp. egenvektorerna (efter normering) en ortonormerad bas som diagonaliserar ekvationerna

$$\left(-\hbar^2/(2m)\,\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) v(\mathbf{r}) = b(\mathbf{r}) \qquad \text{respektive} \qquad Av = b$$

1. Rätvinkliga koordinater

1.1. Separera variabler

Separera variablerna genom ansatsen

$$u(x, y, z) = u_{n_1}(x)u_{n_2}(y)u_{n_3}(z)$$

och **visa att** denna ansats, för variabeln x, leder till ekvationen

$$-\hbar^2/(2m)\,u''_{n_1} + 1/2Kx^2u_{n_1} = \lambda_{n_1}u_{n_1}$$

samt att detta ger egenfunktioner

$$u_{n_1n_2n_3}(x, y, z) = u_{n_1}(x)u_{n_2}(y)u_{n_3}(z)$$

med egenvärden $E_{n_1n_2n_3} = \lambda_{n_1} + \lambda_{n_2} + \lambda_{n_3}$.

[1] Matematiska Metoder fk E CTH lp I 98/99 (Jöran Bergh).

[2] Laborationen har utvecklats i samarbete mellan lärare från Matematik och från Fysik.

I litteraturen finner man att egenfunktionerna utgör en ortonormerad bas i skalärprodukten

$$< \psi_1, \psi_2 > = \int\int\int_{R^3} \psi_1(x,y,z)^* \psi_2(x,y,z)\, dxdydz$$

och att exempelvis funktionen

$$u_{n_1}(x) = H_{n_1}(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

där n_1 är ett icke-negativt heltal, löser ekvationen

$$-\hbar^2/(2m)\, u''_{n_1} + 1/2 K x^2 u_{n_1} = \lambda_{n_1} u_{n_1}$$

där

$$\begin{aligned} \lambda_{n_1} &= (n_1 + 1/2)\hbar\omega_c \\ \alpha &= (mK/\hbar^2)^{1/4} \\ \omega_c &= (K/m)^{1/2} \end{aligned}$$

De ortonormerade egenfunktionerna är

$$u_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = N_{n_1} N_{n_2} N_{n_3} H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) H_{n_3}(\alpha z) e^{-\alpha^2(x^2+y^2+z^2)/2}$$

där $N_{n_i} = (\alpha/(\pi^{1/2} 2^{n_i}(n_i)!))^{1/2}$, $i = 1,2,3$, med motsvarande energi-egenvärden

$$E_{n_1 n_2 n_3} = (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2)\hbar\omega_c$$

1.2. Beräkna väntevärdet av r^2

Låt nu $\alpha =$ Ditt CTH-nummer, $K = 1$ och låt tillståndsfunktionen vara

$$u = a_1 u_{100} + a_2 u_{010} + a_3 u_{001}$$

där a_1, a_2, a_3 är respektive första, andra och tredje siffran från slutet i Ditt CTH-nummer.

Rita egenfunktionen $u_{100}(x,0,0)$ och beräkna väntevärdet av $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ i tillståndet u. Se vidare under rubriken Redovisning nedan.

2. Polära koordinater

I litteraturen finner man att den tidsoberoende Schrödinger-ekvationen i polära koordinater separeras till de båda ekvationerna

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{\lambda}{r^2}\right\} R = 0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} + \lambda Y = 0$$

vid ansatsen $u(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$. Potentialen $V(r) = Kr^2/2$ beror ju endast på r. Vidare finner man att "de sfäriskt harmoniska" funktionerna Y_{lm} är ortonormerade egenfunktioner med egenvärdena $-\lambda = -l(l+1)$.

2.1. Ansats för radiella egenfunktioner

Ansätt nu, med samma konstanter som tidigare,

$$\chi(y) = y/\alpha R(y/\alpha)$$

och **visa att** denna ansats, med $\mu = 2E/(\hbar\omega_c)$, leder till

$$-\frac{\hbar^2\alpha^4}{2m}\,\chi'' + \frac{K}{2}\,y^2\chi + \frac{\hbar^2\alpha^4}{2m}\frac{l(l+1)}{y^2}\,\chi = \alpha^2 E\chi$$

och

$$\chi'' - y^2\chi - \frac{l(l+1)}{y^2}\chi + \mu\chi = 0$$

Ansätt här

$$\chi(y) = P(y)e^{-y^2/2}$$

och **visa att** detta leder till ekvationen

$$y^2P'' - 2y^3P' + (\mu - 1)y^2P - l(l+1)P = 0$$

Potensserieansatsen $P(y) = y^s \sum_{\nu\geq 0} a_\nu y^\nu$, där $s \geq 1$ av regularitetsskäl i origo, ger $s = l+1$, $a_1 = 0$ och rekursionsformeln

$$a_{\nu+2} = \frac{2\nu + 2l + 3 - \mu}{\nu^2 + \nu(5+2l) + 6 + 4l}\,a_\nu$$

Därmed är $a_{2k+1} = 0$ för alla k. Villkoret $\mu = \mu_{nl} = 2n + 2l + 3$ ger ändlig summa i ansatsen. **Visa** påståendena om koefficienterna!

Ansatserna leder till de ortonormerade egenfunktionerna

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\frac{P_{nl}(\alpha r)}{r}e^{-\alpha^2r^2/2}$$

där $P_{nl}(y)/y^{l+1}$ tydligen är jämna polynom av grad n (n måste alltså vara jämnt!) med egenvärdena

$$E_{nl} = E_{n'} = (n' + 3/2)\hbar\omega_c$$

där $n' = n + l$. (Jämför med lösningarna i rätvinkliga koordinater!)

Slutligen får man en ortonormerad bas av egenfunktioner

$$u_{nlm}(r,\theta,\phi) = N_{nl}\frac{P_{nl}(\alpha r)}{r}\,e^{-\alpha^2r^2/2}Y_{lm}(\theta,\phi)$$

till den tidsoberoende Schrödinger-ekvationen i polära koordinater för den harmoniska oscillatorn.

2.2. Beräkna väntevärdena av r och r^2

Beräkna normeringskonstanten N_{21} approximativt och rita R_{21}. Beräkna väntevärdena av r och r^2 för tillståndet u_{210}. **Förklara** varför det inte går att beräkna enbart väntevärdet av r och sedan kvadrera. Se vidare under rubriken Redovisning nedan.

Genomförande och Frågor

Laborationen genomförs antingen individuellt eller som samarbete av två personer. Ingen särskild handledning kommer att ske. Manualer finns i datorrummen, och i MATLAB finns hjälp via kommandon av typen `help kommando` .

Eventuella oklarheter kan Du ta upp i anslutning till undervisningen.

Redovisning

Redovisa genom att **lämna egen, personligen utförd, redogörelse** helst före kursens slut, dock senast i tentamensperioden. (Senare inkomna redogörelser ger ingen bonus.) Redogörelsen lämnas i samband med undervisningen eller till expeditionen Matematik CTH. Redogörelsen skall bl.a. innehålla följande för respektive uppgift.

1. Dina med **fetstil** efterfrågade resonemang i 1.1, 2.1 och 2.2 med förutsättningar, resonemang och slutsatser angivna så att en genomsnittlig kurskamrat utan svårighet kan följa Din framställning.

2. Figurer som visar graferna av de två angivna egenfunktionerna i 1.2 respektive 2.2.

3. Ditt CTH-nummer α.

   Ditt första kontrolltal med cirka 15 siffror i koordinaterna som MATLAB levererar efter kommandot `format long` när Du beräknar väntevärdet av väntevärdet av r^2 i 1.2, efter integration med kommandot `quad` över intervallet (-10,10) och med inbyggda toleransen.

   Ditt andra och tredje kontrolltal med cirka 15 siffror som MATLAB levererar efter kommandot `format long` när Du beräknar normeringskonstanten och väntevärdet av r i 2.2, båda genom att integrera med kommandot `quad` över intervallet (0,10) och med inbyggda toleransen.

   Motsvarande gäller om Du använder MATHEMATICA i stället för MATLAB.