Kommentarer till matlabfiler samt allmänna råd

Staffan Ovesson

August 25, 2000

1 Lösningsmetod

Uppgiften går alltså ut på att studera en partikels rörelse i en (endimensionell) harmonisk oscillatorpotential. Egenfunktionerna till harmoniska oscillotorn är kända:

$$u_n(y) = A_n H_n(y) \mathrm{e}^{-y^2/2} \tag{1}$$

där H_n är det n:te Hermite-polynomet,

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \sqrt{\alpha} x \tag{2}$$

och

$$A_n = \left(\frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2}. \tag{3}$$

Egenvärdena ges av $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Vågfunktionen blir då lätt att beräkna:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n(x) \mathrm{e}^{-(i/\hbar)E_n t}. \tag{4}$$

Koefficienterna bestäms av begynnelsevillkoret enligt

$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \psi(x,0) dx \tag{5}$$

När $\psi(x,t)$ är bestämd, kan partikelns begynnelseläge, $x(0)$ väljas fritt, och i labben kommer du att beräkna många trajektorior, $x(t)$, för varje vågfunktion. Trajektorian beräknas ur lotsvillkoret med någon metod för ordinära differentialekvationer.

2 Lite om räkningarna

Som alltid när man löser ett problem numeriskt, får man ta hänsyn till konvergens. T.ex. måste ju summan i ekv. 4 trunkeras någonstans. F.n. görs detta vid $n = 18$, men det kan ju behöva ökas eller minskas. Hur noggrann beräkningen av partikelbanorna blir beror på hur många punkter längs x respektive t som vågfunktionen är beräknad för, och här får man prova sig fram. Vid beräkningen av $x(t)$ kan ju alla möjliga värden av x och t förekomma (och alltså inte bara de som tillhör (x,t)-griden), så någon form av interpolation blir nödvändig. Ett alternativ är att bara evaluera vågfunktionen allt eftersom den behövs i beräkningen av $x(t)$, men då måste summan i ekv. 4 beräknas väldigt många gånger. I de filer som står till förfogande är tiden indelad i N intervall mellan tiderna $t_0, t_1, \ldots, t_N$. I varje sådant intervall berk̈nas först vågfunktionen och dess rumsderivata och sedan tidsutvecklingen av partikelns (partiklarnas) läge(n) över intervallet. Poängen med det förfarandet är bara att undvika att vågfunktionen äter upp allt minne, så på en dator med mycket minne behövs det inte.

Ett lite speciellt problem är att skapa de fördelningar av $x(0)$ som behövs i uppgift 2 och 3. Att generera slumptal enligt en given fördelning är inte så lätt som man kan tro, och förhoppningsvis skall du inte behöva sätta dig in i det utan kunna använda de aktuella funktionerna rakt av.

3 Filerna

Filerna ligger i tre bibliotek, svarande mot de tre uppgifterna. Vissa filer förekommer i mer än ett bibliotek, men det kan finnas smärre skillnader. Filerna `scriptuppg*.m` är makron, färdiga att köra vid matlabprompten och motsvarar uppgifterna 1, 2 och 3. Huvuddelen av arbetet skall förhoppningsvis vara att redigera och köra dessa script. Av de andra filerna är det bara `psi_init.m` som du måste redigera själv. Det betyder inte att de andra filerna är "svarta lådor"; det skall inte vara alltför svårt att sätta sig in i vad de gör, om något behöver ändras.

Uppgift 1:

-`scriptuppg1.m`,	exekverbart matlabscript (kommandofil)
-`psi_init.m`,	specificerar $\psi(x, 0)$
-`harm3.m`,	skapar vågfunktionen och dess rumsderivata
-`guidance.m`,	beräknar partikelbanan mellan två punkter utifrån vågfunktionen, dess derivata och begynnelseläget
-`guide.m`,	innehåller själva lotsvillkoret, anropas i `guidance.m`

Uppgift 2:

-`scriptuppg2.m`,	exekverbart matlabscript
-`gen_dist.m`,	skapar ett antal begynnelsevillkor x_0, fördelade enligt $\psi(x,0)\|^2$, där $\psi(x,0)$ definieras i `psi_init.m`
-`ratio.m`,	funktion som används av `gen_dist.m`.

I övrgit, se uppgift 1.

Uppgift 3:

-`scriptuppg3.m`,	exekverbart matlabscript

I övrigt, se ovan.