

Wstęp do programu Mathematica

Zadanie 1. Oblicz wartości całek:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{\infty} dx x^8 e^{-x^2} \\ I_2 &= \int_0^{\infty} dx x^{2k+1} e^{-\alpha x^2}, k \in \mathbb{N}, \alpha > 0 \\ I_3 &= \int_0^{\infty} dx x^{2k} e^{-\alpha x^2}, k \in \mathbb{N}, \alpha > 0 \\ I_4 &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \sin^5(x) \end{aligned}$$

Zadanie 2. Zdefiniować funkcję:

$$h(x) = 24 + 10x - 15x^2 + x^4$$

Obliczyć $h'(x)$, narysować jej wykres dla $-4 \leq x \leq 4$. Znaleźć miejsca zerowe $h'(x)$. Obliczyć wartość drugiej pochodnej w miejscach zerowych.

Zadanie 3. Za pomocą programu Mathematica proszę znaleźć współczynniki rozkładu wektora $[-2, -1, 1]$ w bazie $\{[1, 1, 0], [1, 0, 1], [0, 1, 1]\}$. Podpowiedź: można rozwiązać układ równań na współczynniki, bądź rozwiązać równanie macierzowe.

Zadanie 4. Przedstaw na jednym wykresie funkcję $\Psi_{1s}(r)$ atomu wodoru oraz zoptymalizowaną funkcję próbną $\Psi_{\text{opt}}(r)$ uzyskaną metodą wariacyjną:

$$\begin{aligned} \Psi_{1s}(r) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \\ \Psi_{\text{opt}}(r) &= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha r^2}, \alpha = \frac{8}{9\pi}. \end{aligned}$$

Użyj zakresu $r \in [0, 5]$. Stwórz legendę.

Zadanie 5. Znajdź pierwszą poprawkę do energii dla n -tego stanu oscylatora harmonicznego z zaburzeniem postaci:

1. $V(x) = x^3$,
2. $V(x) = x^4$,
3. $V(x) = x^6$.

Funkcje własne oscylatora harmonicznego mają postać:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) e^{-x^2/2}, \quad (5.1)$$

gdzie $H_n(x)$ oznacza wielomian Hermite'a n -tego stopnia.

Wskazówki: Skonstruuj tablicę, której elementami będą poprawki do energii dla kilku pierwszych stanów np. do $n = 10$. Używając funkcji `Fit` dopasuj postać wielomianu k -tego stopnia do rozwiązania. Przez porównanie na jednym wykresie (funkcja `Show`) sprawdź, czy założony stopień wielomianu poprawnie odtwarza obliczone wartości.

Zadanie 6. Do opisu oddziaływania między dwoma atomami można zastosować tak zwany potencjał Morse'a:

$$V(r; a, b, c) = a \left[\left(1 - e^{-\sqrt{\frac{b}{2a}}(r-c)} \right)^2 - 1 \right], \quad (6.1)$$

gdzie parametry $a, b, c > 0$ są parametrami potencjału, zaś $r > 0$ jest odległością między atomami (czyli zależy od względnej odległości jąder atomowych). Proszę zinterpretować znaczenie fizyczne parametrów a, b, c . Aby to zrobić, proszę:

- zdefiniować ten potencjał w *Mathematice* jako funkcję (4 zmiennych),
- zbadać granicę w $r \rightarrow 0$ oraz $r \rightarrow \infty$ pamiętając o założeniu $a, b, c > 0$,
- zbadać, czy potencjał posiada ekstrema (polecenia `D[f[x], {zmienna, rząd pochodnej}]` oraz `Solve[f[x]==A, zmienna]`. Jeżeli posiada, to określić, dla jakich odległości międzyatomowych r . Należy również sprawdzić, jakiego rodzaju są ewentualne ekstrema.
- jeżeli potencjał posiada ekstrema, to zbadać jego wartość dla tych ekstremów.
- rozwinąć potencjał w szereg Taylora wokół położenia minimum do członów trzeciego rzędu (polecenie `Series[f[x], {x, x0, n}]`).
- używając poleceń `Manipulate` oraz `Plot`, proszę zbadać wpływ wartości parametrów na wygląd funkcji [a, b, c w przedziale $(1, 5)$].

Zadanie 7. (dla chętnych) Rozpatrzmy jednowymiarowy problem z potencjałem zadany jako:

$$V_L(x) = -2x, \quad (7.1)$$

$$V_R(x; b, c) = \frac{1}{2}x^2 + bx + c, \quad (7.2)$$

gdzie V_L i V_R oznaczają potencjał odpowiednio lewo- i prawostronny, zaś parametry b, c należy dobrać tak, aby zapewnić w $x = 0$ ciągłość $U(x; b, c)$ i $dU(x; b, c)/dx$ dla:

$$U(x; b, c) = V_L(x)\theta(-x) + V_R(x; b, c)\theta(x), \quad (7.3)$$

gdzie $\theta(x)$ oznacza funkcję Theta Heaviside'a (`HeavisideTheta[x]`). Naszym celem jest zbadanie, w jaki sposób zmieniają się funkcje falowe uciągniętego potencjału $V(x) = U(x, b, c)$ (b, c odpowiednio dobrane) względem potencjału oscylatora harmonicznego $V_{\text{harm}}(x) = \frac{1}{2}kx^2$.

Aby dobrać współczynniki b, c należy:

- zdefiniować w programie potencjały lewy i prawy,
- zdefiniować „główny” potencjał $U(x; b, c)$ zadany równaniem (7.3),
- narysować potencjał $U(x; b = 1, c = 1)$, aby przekonać się, że generalnie jest on nieciągły,
- zdefiniować pierwsze pochodne potencjałów (polecenie `D[funkcja, {zmienna, rząd pochodnej}]`)
- rozwiązać układ równań liniowych $\{V_L(0) == V_R(0; b, c), V_L'(0) == V_R'(0; b, c)\}$ względem b, c , aby wyznaczyć fizyczne wartości parametrów (polecenie `Solve[układ, zmienne]`), tzn takie wartości b, c , dla których następuje zszycie
- narysować zszyty potencjał $V(x) = U(x; b, c)$ (ze znalezionymi b, c) dla $x \in [-15, 15]$.

Proszę zastosować metodę wariacyjną:

$$E[\phi] = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (7.4)$$

w celu znalezienia najlepszego przybliżenia do funkcji własnych potencjału $V(x)$. Przypominamy, że:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) \left(\hat{H} \phi(x) \right), \\ \langle \phi | \phi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) \phi(x), \\ \hat{H} &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \end{aligned}$$

Jako funkcję próbną przyjąć liniową kombinację funkcji własnych 1-dim oscylatora harmonicznego:

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^K c_i \varphi_i(x), \quad (7.5)$$

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{2^i i! \sqrt{\pi}}} H_i(x - x_{\min}) e^{-\frac{(x - x_{\min})^2}{2}}. \quad (7.6)$$

gdzie $H_i(x - x_{\min})$ oznacza wielomian Hermite'a i -tego stopnia od zmiennej $x - x_{\min}$, zaś x_{\min} oznacza punkt scentrowania potencjału (założony potencjał $V(x)$ nie jest scentrowany wokół $x = 0$).

Minimalizacja funkcjonału Eq. (7.4) z funkcją falową postaci Eq. (7.5) sprowadza się do rozwiązania równania macierzowego postaci:

$$\mathbf{H}c = E\mathbf{S}c, \quad (7.7)$$

gdzie $\mathbf{H} = [H_{ij}]_{i,j=0,\dots,K}$, $\mathbf{S} = [S_{ij}]_{i,j=0,\dots,K}$ oraz $c = [c_i]_{i=0,\dots,K}$. Otrzymaliśmy problem, który nazywa się w algebrze *uogólnionym problemem własnym*, czyli równaniem własnym na macierz \mathbf{H} z niediagonalną macierzą całek nakrywania (metryczną) \mathbf{S} . Gdy macierz \mathbf{S} jest jednostkowa, problem redukuje się do zwykłego zagadnienia własnego.

Wskazówki:

- wyznaczyć parametr x_{\min} ,
- zdefiniować funkcję bazy $\varphi[i_ , x_]$ zgodnie z (7.6),
- zdefiniować element macierzowy macierzy \mathbf{S} (komenda `Si j [i_ , j_] := NIntegrate[$\varphi[i, x] \varphi[j, x]$...]`),
- zdefiniować tablicę całek nakrywania \mathbf{S} dla $K = 20$ (polecenie `Table`), i poczekać chwilę aż policzą się całki. Podczas, gdy one trwają, zwrócić uwagę na błędy wyrzucane przez *Mathematikę*,
- wyświetlić \mathbf{S} w formie macierzy używając `MatrixForm` i zastanowić się chwilę,
- analogicznie skonstruować i zdiagnozować macierz hamiltonianu \mathbf{H} (komenda `Eigensystem`). Wygodnie jest automatycznie przesortować układ własny, za pomocą polecenia: `{ee, ev} = Eigensystem[H] // Transpose // Sort // Transpose`. Lista `ee` będzie zawierała posortowane energie własne w kolejności rosnącej, zaś `ev` odpowiadające im wektory własne (czyli współczynniki c_i przybliżonego rozwinięcia dokładnej funkcji falowej w skończonej bazie),
- zdefiniować wektor funkcji bazy, jako np. `vec = Table[$\varphi[i, x]$, {i, 0, K}]`,
- zdefiniować rozwiązanie naszego problemu (7.5) jako iloczyn skalarny zoptymalizowanych współczynników c_i z wektorem funkcji bazy `vec`: `Psi[i_ , x_] := ev[[i]].vec` **UWA-GA**: tutaj ważny jest operator „:=”,
- na wykresie przedstawić jednocześnie potencjał $V(x)$ razem z kwadratem zoptymalizowanej funkcji falowej `Psi` przesuniętym na wykresie o odpowiadającą mu energię własną (na przykład poleceniem `With[{i = 1}, Plot[{ $V[x]$, $25 * Psi[i, x]^2 + ee[[i]]$ }, {x, -15, 15}]]`, jako i możemy przyjąć wartości od 1 do $K + 1$). Czynniki 25 przed `Psi` jest jedynie po to, żeby funkcja falowa była lepiej widoczna na skali rysunku i nie pełni żadnej fizycznej funkcji,
- przeanalizować otrzymane wyniki oraz to, w jaki sposób różnią się one od rozwiązań dla oscylatora harmonicznego w funkcji rosnącego i . Rozwiązanie `Psi[i, x]` porównujemy do `$\varphi[i - 1, x]$` . Jaka jest jego energia?

Przydatne polecenia w Mathematicie

- F1: wywołanie dokumentacji.
- Shift+Enter: wykonanie aktualnej komórki.
- `a = 5` – definicja stałej 'a' o wartości 5.
- `Psi[a_,b_,c_] := abc`
definicja funkcji od zmiennych a, b, c będącej iloczynem zmiennych.
- `Psi1[a_,b_,c_] := Psi[a,b,c]*2:`
definicja nowej funkcji przez odwołanie do starej.
- `Assuming[a > 0 && R > 0, 'polecenie']` – wykonaj 'polecenie', zakładając, że parametr a i R są większe od zera.
- Alternatywnie do ww.: `'polecenie'[... , Assumptions -> Element[k, Integers] && R > 0]`
- `Clear[Psi]` – wyczyść (usuń z pamięci) stałą/funkcję o nazwie Psi.
- `Plot[Sin[x], {x, 0, 6 Pi}]` – wykreśl funkcję $\sin(x)$ w przedziale $x \in [0; 6\pi]$.
- `Lista1 = Array[0. \&, {500,2}]` – zdefiniuj tablicę o nazwie 'Lista1' zawierającą 500 par elementów zainicjalizowanych jako zera.
- `Lista1[[k,1]]` – odwołaj się do 1. elementu k -tej pary 1 w Lista1.
- `Limit[f[a,b], a -> 0]` – policz granicę funkcji f od zmiennych a, b przy a dążącym do zera.
- `FindRoot[f[R,alpha] ==0, {alpha,1}]`
znajdź numerycznie, kiedy zeruje się funkcja $f[R,alpha]$ startując od wartości α równej 1.
- `AlphaMin = FindMinimum[En[R,1], {R,1.2}]`
zadeklaruj stałą 'AlphaMin' równą minimum funkcji 'En'. Minimum funkcji 'En' zależnej od dwóch zmiennych ('R' oraz drugiej zmiennej) znajdowane jest numerycznie, zaczynając poszukiwania od $R=1.2$.
- Używanie programu Mathematica niejednokrotnie wymaga skorzystania z dokumentacji wspomaganiej wyszukiwaniem w przeglądarkach internetowych.

W razie jakichkolwiek wątpliwości odnośnie wykonywania zadania lub poleceń programu Mathematica mogą Państwo konsultować się z osobą prowadzącą ćwiczenia.