Übungsaufgaben zu Physik IV (SS 98)

Ergänzung: Quantenmechanik mit dem Computer

Diese Aufgaben sind als Alternativen zu den Hausaufgaben zum theoretischen Teil der Vorlesung gedacht. Die hier erreichte Punktzahl wird als Bonus zur Gesamtpunktzahl auf den Übungsblättern dazugerechnet.

Die fertigen Programme, geschrieben mit Hilfe eines verbreiteten Computer-Algebra(CA)-Systems (wie Maple, Mathematica, Mupad, Reduce, Axiom, …) können entweder als Ausdruck (ohne vollkommen überflüssige Zwischenausgaben, Papiersparen=aktiver Umweltschutz) oder als Postscript-Datei bzw. Quellcode/Worksheet via E-Mail „abgegeben“ werden.

Hinweis: Zur besseren Übersicht trägt bei, wenn man $\hbar = 1$ und $m = \frac{1}{2}$ wählt.

Aufgabe 1.1 (20 Punkte): Gamow-Faktor

Berechnen Sie für ein Elektron, welches sich in einem Potential der Form

$$V(x) = \exp(-x^4)$$

bewegt, den GAMOW-Faktor T für vier sinnvolle Energien Ihrer Wahl. Versuchen Sie allgemeiner eine Funktion zu schreiben, welcher als Parameter das Potential sowie die Teilchenenergie übergeben werden und die den GAMOW-Faktor zurückgibt. Behandeln Sie das Problem für den Fall, dass es mehr als zwei Schnittpunkte zwischen dem Energieniveau und dem Potential gibt. Hier sollte eine Liste der Tunnelwahrscheinlichkeiten zurückgegeben werden.

Aufgabe 1.2 (20 Punkte): Eigenfunktionen

Berechnen Sie numerisch die symmetrische Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung mit dem Potential

$$V(x) := \frac{1}{2}x^2 + x^4.$$

Behandeln Sie dazu das Anfangswert-Problem der stationären Schrödinger-Gleichung mit $\psi(0) = 1$ und $\psi'(0) = 0$ numerisch. Eine nachträgliche Normierung der so erhaltenen Lösung ist nicht notwendig. Bestimmen Sie die beiden niedrigsten, zu symmetrischen Lösungen gehörenden Energieeigenwerte aus der Bedingung, dass die Energie-Eigenfunktionen nach außen hinreichend schnell abfallen (Normierbarkeit!). Hierfür bietet sich eine Prozedur an, welche die beiden Enden des zu durchsuchenden Energieintervalls sowie eine Genauigkeitsschranke übergeben bekommt und mittels Intervallhalbierung denjenigen Energiewert findet, für welchen die Funktion an einem außen liegenden Punkt betragsmäßig unter der gegebenen Schranke liegt. Plotten Sie die zugehörigen Wellenfunktionen.
Hinweis: Als „weit genug außen“ haben sich bei mir Werte zwischen 3 und 4 erwiesen!
Zusatzfrage: Wie müßten Sie ihr Programm abändern, um die antisymmetrischen Lösungen zu erhalten?

Aufgabe 1.3 (20 Punkte): Zeitentwicklung der Wellenfunktion

Ein freies quantenmechanisches Teilchen habe zum Zeitpunkt $t = 0$ die Wellenfunktion

$$\psi_0(x) = \exp(-x^2 + \hat{\imath}x).$$

Gewinnen Sie durch Diskretisierung der zeitabhängigen Schrödingergleichung in „Zeitrichtung“ einen Ausdruck für die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt $t + \Delta t$ in Abhängigkeit von der Wellenfunktion zum Zeitpunkt t. Approximieren Sie dazu die Zeitableitung durch ihren Differenzenquotienten. Bestimmen Sie die Wellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 1$ mit Schrittweiten von $\Delta t = 0.1$ und $\Delta t = 0.05$ sowie zum Zeitpunkt $t = 2$ mit Schrittweiten von $\Delta t = 0.1$ und $\Delta t = 0.2$. Stellen Sie die Betragsquadrate der normierten Wellenfunktionen gemeinsam in einem Diagramm dar. Was fällt im Vergleich mit der analytischen Lösung (Vorlesung) auf? Diskutieren Sie die auftretenden Diskretisierungsfehler durch Vergleich der resultierenden Näherungen für verschiedene Schrittweiten sowie der exakten Lösung. Wer sich für Diskretisierungsprobleme und systematische Verbesserungen interessiert, kann in der Literatur unter dem Stichwort CRANCK-NICHOLSON-Verfahren weitere Informationen finden.