



Westfälische Wilhelms-Universität
Institut für Theoretische Physik

Bachelorarbeit

**Numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung
mit dem Numerov-Verfahren**

**Numerical solution of the Schrödinger equation
through the Numerov method**

Vorgelegt von Ludwig Jens Papenfort
am 11.07.2011
in Münster

Themensteller

Prof. Dr. Gernot Münster

Zweitgutachter

Prof. Dr. Stefan J. Linz

Ich versichere hiermit, dass ich meine Bachelorarbeit

**Numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung mit dem
Numerov-Verfahren**

selbstständig und ohne fremde Hilfe angefertigt habe, und dass ich alle von anderen Autoren wörtlich übernommenen Stellen wie auch die sich an die Gedankengänge anderer Autoren eng anlehnenden Ausführungen meiner Arbeit besonders gekennzeichnet und die Quellen zitiert habe. Dies gilt auch für alle bildlichen Darstellungen dieser Arbeit.

11.07.2011, Münster

Es handelt sich hierbei um eine geringfügig überarbeitete Fassung (Rechtschreibfehler, formale Darstellungsfehler) der Arbeit, die am 11.07.2011 dem Prüfungsamt vorgelegt wurde.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	1
1 Einleitung	3
2 Theoretische Grundlagen	5
2.1 Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung	5
2.2 Der Knotensatz	6
2.2.1 Oszillationssatz	7
2.2.2 Satz über das Wandern der Knoten	8
2.2.3 Eindeutigkeit der Wellenfunktion	9
2.3 Der Numerov-Algorithmus	10
2.4 Das numerische Lösungsverfahren	11
2.4.1 Anfangsbedingungen	12
2.4.2 Randbedingungen	13
2.4.3 Schießverfahren und Bisektion	14
2.4.4 Implementierung	15
3 Vergleich mit analytischen Lösungen	19
3.1 Der Harmonische Oszillator	20
3.1.1 Das Spektrum	20
3.1.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers	21
3.1.3 Die Wellenfunktionen	24
3.2 Das Pöschl-Teller-Potential	26
3.2.1 Das Spektrum	28
3.2.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers	30
3.2.3 Die Wellenfunktionen	32
3.3 Der unendlich hohe Potentialtopf	34
3.3.1 Das Spektrum	35
3.3.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers	35
3.3.3 Die Wellenfunktionen	38
4 Diskussion und Ausblick	41
5 Anhang	43
Abbildungsverzeichnis	45

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Programm zur numerischen Lösung der eindimensionalen stationären Schrödingergleichung für gebundene Zustände in inversionssymmetrischen Potentialen implementiert. Die Programmiersprache ist C++ und es wurde ein objektorientierter Ansatz gewählt. Zum Übersetzen der Potentialausdrücke in eine für das Programm berechenbare Form, wird die quelloffene Bibliothek *MuParser*¹ genutzt.

Neben den theoretischen Grundlagen, wird das prinzipielle numerische Lösungsverfahren sowie der grundlegende Aufbau des Programms vorgestellt. Anschließend werden die numerischen Ergebnisse analytisch lösbarer Potentiale mit den exakten Werten verglichen. Hier soll insbesondere auf die Energieeigenwerte eingegangen werden.

Der Quellcode des Programms befindet sich im Anhang in digitaler Form.

¹<http://muparser.sourceforge.net/>

1 Einleitung

Die Grundgleichungen der physikalischen Theorien sind nur für einige wenige und einfache Problemstellungen exakt lösbar. Betrachtet man beispielsweise das Zweikörperproblem, aus historischen Gründen auch Keplerproblem genannt, bestehend aus zwei miteinander wechselwirkenden Körpern, so ist dies im Allgemeinen durch eine Separation in Schwerpunkts- sowie Relativkoordinaten analytisch lösbar. In der klassischen Mechanik findet sich dieses Problem in der Bahnbewegung zweier Himmelskörper, die über die Newtonsche Gravitation sich gegenseitig beeinflussen. In der Quantenmechanik ergibt sich dies beim Betrachten des neutralen Wasserstoffatoms, indem ein Elektron über das Coulomb-Potential an Kern gebunden ist.

Wird nun ein weiterer Körper hinzugenommen, und betrachtet damit das sogenannte Dreikörperproblem, ergibt sich, dass dieses im Allgemeinen bereits keine analytisch exakte Lösung mehr besitzt. Eine analytische Lösung ist nur in Ausnahmefällen bestimmbar.

Da reale physikalische Problemstellungen in ihrer Komplexität solche Modellprobleme weit übersteigen, macht man sich numerische Verfahren zu nutze. Diese Verfahren berechnen die aus der Problemstellung folgenden Grundgleichungen näherungsweise und bieten die Möglichkeit, die exakten Ergebnisse, wie sie in der Natur zu beobachten sind, schrittweise zu approximieren. Mit steigender Genauigkeit des Verfahrens, steigt sogleich der Aufwand der Berechnung. Daher wird heutzutage für solche Berechnungen der Computer genutzt, welcher sehr viel mehr Rechenoperationen pro Sekunde durchführen kann als ein Mensch je könnte.

Es sollte jedoch beachtet werden, dass durch die endliche Genauigkeit der maschinellen Darstellung der Zahlen und der teilweise eingeschränkten Fähigkeiten der numerischen Lösungsverfahren, im Allgemeinen die produzierten Ergebnisse überprüft werden müssen. Man kann nicht davon ausgehen, dass ein Lösungsverfahren problemlos die exakten Ergebnisse annähert, wenn nicht alle Rechenschritte in ihrer Richtigkeit überprüft werden können. So führen beispielsweise Rundungsfehler oder Zahlen außerhalb der möglichen maschinellen Darstellung zu systematischen Fehlern.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein solches numerisches Verfahren zur Lösung der eindimensionalen stationären Schrödinger-Gleichung implementiert. Dabei wird sich auf die gebundenen Zustände in inversionssymmetrischen Potentialen beschränkt.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist im allgemeinen Fall eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung und beschreibt die Dynamik nicht-relativistischer Quantensysteme. Sie ist damit die Grundgleichung der Quantenmechanik und lautet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (2.1)$$

Der Hamiltonoperator \hat{H} kann durch das Korrespondenzprinzip aus der klassischen Hamiltonfunktion des betrachteten Systems gewonnen werden. Für ein spinloses Teilchen der Masse m im dreidimensionalen Raum unter Einfluss des Potentials $V(\vec{r}, t)$ ergibt sich damit in Ortsdarstellung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] |\Psi\rangle \quad (2.2)$$

Ist das Potential $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$ unabhängig von der Zeit, so ergibt sich durch Separation von der Zeit die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Diese beschreibt stationäre Zustände und lautet:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.3)$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators, wobei die Energie E des Zustandes $|\Psi\rangle$ der Eigenwert zum Operator \hat{H} ist. Die Wellenfunktion zum Zustand $|\Psi\rangle$ muss gleichzeitig die Normierungsbedingung erfüllen, damit diese im Zuge der statistischen Interpretation der Quantenmechanik auf eine normierte Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = |\Psi|^2$ überführt werden kann.

Unter Zuhilfenahme des Hamiltonoperators des betrachteten Systems sowie der Randbedingungen, kann daher durch Lösung des Eigenwertproblems auf den Zustand und seine Energie geschlossen werden. Aus der normierten Wellenfunktion des Zustandes $|\Psi\rangle$ folgt gleichzeitig die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ρ .

Die stationäre Schrödinger-Gleichung ist im Allgemeinen noch immer eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung und nur für sehr einfache Potentiale analytisch exakt lösbar.

Im Idealfall besitzt das betrachtete Potential eine spezielle Symmetrie, wie z.B. eine Kugel- oder Zylindersymmetrie, wodurch die stationäre Schrödinger-Gleichung auf gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung reduziert werden kann.

Der Hamiltonoperator ist dann auf eine Summe von kommutierenden Anteilen reduzierbar. Die Eigenfunktionen zu einem solchen Hamiltonoperator bilden einen Produktzustand.

Die Separation der verschiedenen Koordinaten führt zur eindimensionalen stationären Schrödinger-Gleichung, welche nur noch von einer Koordinate abhängig ist. Sie stellt wieder ein Eigenwertproblem mit den angesprochenen Randbedingungen dar und lautet in Ortsdarstellung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (2.4)$$

Die Lösung ist bis auf einen konstanten Normierungsfaktor eindeutig bestimmt. Dies wird in Abschnitt 2.2 formal bewiesen.

Das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Programm löst diese Differentialgleichung für inversionssymmetrische Potentiale und darin gebundene Zustände. Hier besitzen die Wellenfunktionen $\Psi(x)$ entweder gerade oder ungerade Parität¹.

Es existieren einige einfache eindimensionale Potentiale, für die Gleichung (2.4) exakt lösbar ist. Zu den inversionssymmetrischen Potentialen gehören der unendlich hohe Potentialtopf, der harmonische Oszillator und das Pöschl-Teller-Potential, auf die im Rahmen dieser Arbeit, in der Form eines Vergleichs mit der numerischen Lösung zurückgegriffen wird.

Die Relevanz der eindimensionalen Modellprobleme liegt in der Möglichkeit, viele physikalisch komplexe Systeme näherungsweise durch diese zu beschreiben. Auch das analytisch exakt lösbare Wasserstoffproblem ist auf drei eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichungen reduzierbar und damit mathematisch einfacher zu handhaben.

Im Folgenden wird mit Schrödinger-Gleichung immer auf die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung verwiesen.

2.2 Der Knotensatz

Betrachtet man ein eindimensionales zeitunabhängiges Potential mit globalem Minimum V_0 , wobei es für $x \rightarrow \pm\infty$ gegen die Konstanten $V_{+,-} > V_0$ konvergiert, so gilt für die Energieniveaus der gebundenen Eigenzustände $E < V_{+,-}$. Konvergiert das Potential in beide Richtungen gegen Unendlich, so sind zwangsläufig nur gebundene Zustände möglich.

Im Eindimensionalen sind diese gebundenen Eigenzustände durch eine Quantenzahl $n \in \mathbb{N}$ abzählbar. Die Energieniveaus, welche die Eigenwerte zum Hamiltonoperator sind, zeigen ein diskretes Spektrum. Die Eigenzustände sind deswegen allein durch n charakterisierbar.

¹Dies folgt aus der Tatsache, dass der Hamiltonoperator mit dem Paritätsoperator kommutiert, da $V(x) = V(-x)$ ist. Die Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator sind daher gleichzeitig Eigenfunktionen des Paritätsoperators und müssen zwangsläufig eine definierte Parität aufweisen.

Um nun bei einer numerischen Berechnung eines solchen Zustandes auf die jeweilige Quantenzahl schließen zu können, muss ein Zusammenhang zu dessen Wellenfunktion gefunden werden. Dies führt zu dem sogenannten Knotensatz.

Knotensatz

Ist $\Psi_n(x)$ die Lösung der Schrödingergleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_n(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \Psi_n(x) = 0 \quad (2.5)$$

zum Energienivea E_n ($n = 1, 2, 3 \dots$), so besitzt diese $n - 1$ Knoten.

Die Knoten sind dabei die Nullstellen der Wellenfunktion, ausgenommen der Grenzwerte für $x \rightarrow \pm\infty$.

Die Nullstellen der Wellenfunktionen sind ausschließlich einfache Nullstellen. Für eine mehrfache Nullstelle x_0 gilt:

$$\Psi(x_0) = 0 \text{ und } \frac{d\Psi}{dx}(x_0) = 0 \quad (2.6)$$

Da eine Lösung der Schrödingergleichung durch diese beiden Anfangsbedingungen bereits festgelegt und bis auf einen konstanten Normierungsfaktor eindeutig ist, führt dies zwangsläufig auf die triviale Lösung $\Psi(x) = 0$.

Der Knotensatz folgt aus den Aussagen des Oszillationssatzes sowie dem Satz über das Wandern der Knoten, welche im Folgenden bewiesen werden sollen (vgl. [Rol03]).

2.2.1 Oszillationssatz

Oszillationssatz

Seien $\Psi_{n,m}(x)$ Lösungen der Schrödingergleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_{n,m}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_{n,m} - V(x)) \Psi_{n,m}(x) = 0 \quad (2.7)$$

zum Energienivea $E_{n,m}$ mit $E_n < E_m$, so liegt zwischen zwei aufeinander folgende Nullstellen x_0 und x_1 von $\Psi_n(x)$ mindestens eine Nullstelle von $\Psi_m(x)$.

Zum Beweis dieses Satzes führe man das Gegenteil zum Widerspruch.

Dazu multipliziere man Gleichung (2.7) mit $\Psi_m(x)$ bzw. $\Psi_n(x)$ und subtrahiere die gewonnenen Gleichungen voneinander. Daraus ergibt sich ein Zusammenhang, der unabhängig vom Potential ist:

$$\frac{2m}{\hbar^2} (E_m - E_n) \Psi_n \Psi_m = -\frac{d}{dx} W(\Psi_n, \Psi_m) \quad (2.8)$$

Dabei stellt

$$W(\Psi_n, \Psi_m) = \Psi_n \frac{d\Psi_m}{dx} - \Psi_m \frac{d\Psi_n}{dx} \quad (2.9)$$

die sogenannte Wronski-Determinante dar. Wird nun Ausdruck (2.8) von der Nullstelle x_0 zur Nullstelle x_1 von $\Psi_n(x)$ integriert und o.B.d.A. sei angenommen, dass $\Psi_n(x) > 0$ und $\Psi_m(x) > 0$ für $x \in (x_0, x_1)$, so folgt:

$$[-W(\Psi_n, \Psi_m)]_{x_0}^{x_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_m - E_n) \int_{x_0}^{x_1} \Psi_n \Psi_m > 0 \quad (2.10)$$

Da $\Psi_m(x) > 0$ für $x \in (x_0, x_1)$, besitzt sie in diesem Intervall keine Nullstelle. An den Rändern des Intervalls soll daher gelten:

$$\Psi_m(x_{0,1}) \geq 0 \quad (2.11)$$

Mit der stetigen Differenzierbarkeit von $\Psi_n(x)$ mit $\Psi_n(x) > 0$ für $x \in (x_0, x_1)$ folgt:

$$\frac{d\Psi_n}{dx}(x_0) > 0 \quad \text{und} \quad \frac{d\Psi_n}{dx}(x_1) < 0 \quad (2.12)$$

Daraus ergibt sich jedoch für die linke Seite von Gleichung (2.10):

$$[-W(\Psi_n, \Psi_m)]_{x_0}^{x_1} = \Psi_m(x_1) \frac{d\Psi_n}{dx}(x_1) - \Psi_m(x_0) \frac{d\Psi_n}{dx}(x_0) \leq 0 \quad (2.13)$$

Dies steht allerdings im Widerspruch zur Aussage (2.10). Die Lösung $\Psi_m(x)$ muss im Intervall $x \in (x_0, x_1)$ mindestens eine Nullstelle besitzen.

2.2.2 Satz über das Wandern der Knoten

Satz über das Wandern der Knoten

Sei $\Psi_E(x)$ Lösung der Schrödingergleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi_E(x) = 0 \quad (2.14)$$

zum Energieeigenwert E , mit $\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_E(x) = 0$. Ist nun x_E eine Nullstelle dieser Lösung so gilt:

$$\frac{d}{dE} x_E > 0 \quad (2.15)$$

Die Nullstelle wandert für steigende Energie E zu größeren Werten.

Um dies zu zeigen, bilde man die Wronski-Determinante $W\left(\frac{\partial \Psi_E}{\partial E}, \Psi_E\right)$. Über dem Intervall $[x_E, \infty)$ gilt für diese mit $\varphi = \frac{\partial \Psi_E}{\partial E}$:

$$[W(\varphi, \Psi_E)]_{x_E}^{\infty} = -\varphi(x_E) \frac{d\Psi_E}{dx}(x_E) \quad (2.16)$$

Wobei die Randbedingung $\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_E(x) = 0$ sowie die Tatsache, dass x_E eine Nullstelle ist, ausgenutzt wurden. Mit der Beziehung

$$\frac{d}{dx} \left(\varphi \frac{d\Psi_E}{dx} - \Psi_E \frac{d\varphi}{dx} \right) = \varphi \frac{d^2\Psi_E}{dx^2} - \Psi_E \frac{d^2\varphi}{dx^2} \quad (2.17)$$

geht Gleichung (2.16) über in:

$$-\varphi(x_E) \frac{d\Psi_E}{dx}(x_E) = \int_{x_E}^{\infty} \left(\varphi \frac{d^2\Psi_E}{dx^2} - \Psi_E \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right) dx \quad (2.18)$$

Wird nun die Schrödinger-Gleichung (2.14) nach der Energie differenziert, ergibt sich mit Hilfe der Produktregel:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [(V - E) \varphi - \Psi_E] \quad (2.19)$$

Formt man Gleichung (2.14) nach $\Psi_E(x)$ um und setzt dies mit (2.19) in (2.18) ein, so folgt:

$$-\varphi(x_E) \frac{d\Psi_E}{dx}(x_E) = \int_{x_E}^{\infty} \Psi_E^2(x) dx \quad (2.20)$$

Da x_E eine Nullstelle der Wellenfunktion $\Psi_E(x)$ zum Energieniveau E ist, gilt außerdem:

$$\frac{d}{dE} \Psi_E(x_E) = 0 = \varphi(x_E) + \frac{\partial \Psi_E}{\partial x_E} \frac{\partial x_E}{\partial E} \quad (2.21)$$

Einsetzen von Gleichung (2.20) in (2.21) ergibt insgesamt:

$$\frac{\partial x_E}{\partial E} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{[\varphi(x_E)]^2}{\int_{x_E}^{\infty} \Psi_E^2(x) dx} > 0 \quad (2.22)$$

2.2.3 Eindeutigkeit der Wellenfunktion

Eindeutigkeit der Wellenfunktion

Ist $\Psi_n(x)$ die Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_n(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \Psi_n(x) = 0 \quad (2.23)$$

zum Energieniveau E und genügt sie der Normierungsbedingung, so ist diese bis auf eine Normierungskonstante $N \in \mathbb{C}$ eindeutig bestimmt.

Zum Beweis soll angenommen werden, dass $\Psi_1(x)$ und $\Psi_2(x)$ Lösungen der Schrödinger-Gleichung zum selben Energieniveau E seien und die aus der Normierungsbedingung folgenden Randbedingungen erfüllen.

Aus der allgemeingültigen Gleichung (2.8) folgt für $E_n = E_m = E$:

$$\frac{d}{dx} W(\Psi_1, \Psi_2) = 0 \quad (2.24)$$

Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass die Wronski-Determinante $W(\Psi_1, \Psi_2)$ einer Konstanten K entspricht. Damit ergibt sich:

$$\Psi_1 \frac{d\Psi_2}{dx} - \Psi_2 \frac{d\Psi_1}{dx} = K \quad (2.25)$$

Da nach der Normierungsbedingung $\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_{1,2}(x) = 0$ gilt, muss folglich $K = 0$ sein. Dies führt aber zu einer gleichen logarithmischen Ableitung:

$$\frac{d}{dx} \ln(\Psi_1) = \frac{d}{dx} \ln(\Psi_2) \quad (2.26)$$

Mit dem konstanten Normierungsfaktor $N \in \mathbb{C}$ folgt insgesamt:

$$\Psi_1(x) = N\Psi_2(x) \quad (2.27)$$

2.3 Der Numerov-Algorithmus

Die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und kann daher mit Hilfe von allgemeinen numerischen Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen, wie beispielsweise dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren, gelöst werden. Die verschiedenen Lösungsverfahren unterscheiden sich hinsichtlich Aufwand und Genauigkeit.

Das Numerov Verfahren stellt nun ein spezielles numerisches Lösungsverfahren dar, welches die Struktur der Schrödingergleichung zwecks höherer Genauigkeit ausnutzt.

Zuerst forme man die Schrödingergleichung in eine numerisch besser handzuhabende Form um. Aus Gleichung (2.4) wird

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + F(x) \Psi(x) = 0 \quad \text{mit} \quad F(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)). \quad (2.28)$$

Diskretisiert man nun die kontinuierliche Variable x durch diskrete Werte $x_i = i \cdot h$, wobei h eine konstante Schrittweite darstellt, so kann man die Wellenfunktion $\Psi(x)$ nach dieser Schrittweite entwickeln. Die Taylorentwicklung an den Orten $x \pm h$ ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \Psi(x \pm h) = & \Psi(x) \pm h\Psi^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2}\Psi^{(2)}(x) \pm \frac{h^3}{6}\Psi^{(3)}(x) \\ & + \frac{h^4}{24}\Psi^{(4)}(x) \pm \frac{h^5}{120}\Psi^{(5)}(x) + \mathcal{O}(h^6). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Um nun zu einer Rekursionsformel für den Wert der Wellenfunktion am Ort $x + h$ in Abhängigkeit von $\Psi(x)$ sowie $\Psi(x - h)$ zu gelangen, werden beide Taylorentwicklungen addiert.

$$\Psi(x + h) + \Psi(x - h) = 2\Psi(x) + h^2\Psi^{(2)}(x) + \frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x) + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.30)$$

An diesem Punkt kann die spezielle Form der Schrödinger-Gleichung ausgenutzt werden. Die zweite und vierte Ableitung der Wellenfunktion nach dem Ort lassen sich mit Hilfe von Gleichung (2.28) durch die Wellenfunktion selbst ausdrücken.

$$\Psi^{(2)}(x) = -F(x)\Psi(x) \quad (2.31)$$

$$\Psi^{(4)}(x) = -\frac{d^2}{dx^2}(F(x)\Psi(x)) \quad (2.32)$$

Ersetzt man in Gleichung (2.30) die zweite Ableitung durch den Ausdruck (2.31) und vernachlässigt die folgenden Terme der Ordnung h^4 , so folgt eine zweigliedrige Rekursionsformel mit einem lokalen Fehler der Ordnung h^4 .

$$\Psi(x + h) = 2\Psi(x) - h^2F(x)\Psi(x) - \Psi(x - h) + \mathcal{O}(h^4) \quad (2.33)$$

Aus Gleichung (2.30) folgt weiterhin eine Näherung der zweiten Ableitung als Differenzenquotient.

$$\Psi^{(2)}(x) = \frac{\Psi(x + h) - 2\Psi(x) + \Psi(x - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.34)$$

Wird nun die zweite Ableitung in Gleichung (2.32) durch diesen Differenzenquotienten dargestellt, und der Ausdruck wieder in Gleichung (2.30) einsetzt, erhält man eine zweigliedrige Rekursionsformel mit einem lokalen Fehler der Ordnung h^6 .

$$\Psi(x + h) = \frac{2\Psi(x) - \frac{h^2}{12}(10F(x)\Psi(x) + F(x - h)\Psi(x - h)) - \Psi(x - h)}{1 + \frac{h^2}{12}F(x + h)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.35)$$

Dies ist die Rekursionsformel des Numerov-Algorithmus. Sind zwei nebeneinander liegende Punkte der Wellenfunktion als Anfangsbedingung bekannt, kann die gesamte Wellenfunktion durch diese Rekursion berechnet werden. Der Vorteil gegenüber anderen Lösungsverfahren ist die höhere Genauigkeit bei geringem Aufwand in der Berechnung, da in dieser nur elementare Rechenschritte vorkommen.

2.4 Das numerische Lösungsverfahren

Das im Rahmen dieser Arbeit geschriebene Programm implementiert in der Programmiersprache C++ den Numerov-Algorithmus für beliebige eindimensionale inversionssymmetrische Potentiale, welche für $x \rightarrow \infty$ gegen eine Konstante oder aber

gegen Unendlich konvergieren. Als Symmetriearchse wird immer $x = 0$ angenommen, wobei das Potential nur im Intervall $[0, \infty)$ betrachtet wird. Auch Potentiale die keine Inversionssymmetrie aufweisen, werden daher als spiegelsymmetrisch angenommen und an $x = 0$ gespiegelt. Es ist also gar nicht möglich dem Programm ein Potential ohne Inversionssymmetrie zu übergeben.

Die Wellenfunktionen in einem solchen Potential weisen, angefangen beim geraden Grundzustand, abwechselnd gerade und ungerade Parität auf ([Nol09a]). Dies wird bei der Wahl der Anfangsbedingungen der Iteration ausgenutzt.

Als weitere Forderung muss das globale Minimum des Potentials größer bzw. gleich Null sein. Dies ist eine reine Festlegung um etwaige Vorzeichenwechsel des Potentials innerhalb der Berechnung auszuschließen und bewirkt lediglich eine konstante Verschiebung der Energieeigenwerte.

Die prinzipielle Vorgehensweise des Lösungsverfahrens entspricht dem in der Literatur ([Sch95]) vorgeschlagenen Verfahren.

2.4.1 Anfangsbedingungen

Die Anfangsbedingungen, welche für die Rekursion benötigt werden, vereinfachen sich aufgrund der Symmetrie des Potentials erheblich. Der Grundzustand besitzt eine gerade Wellenfunktion und die darauf folgenden abwechselnd gerade und ungerade Parität.

Der Grundzustand wird mit der Quantenzahl $n = 0$ belegt, wodurch folgt, dass die Wellenfunktionen gerader Quantenzahl gerade Parität und die ungerader Quantenzahl ungerade Parität aufweisen.

Im Fall von ungerader Parität muss die Wellenfunktion im Ursprung einen Knoten besitzen. Die Startwerte der Rekursion werden zu

$$\Psi(0) = \Psi_0 = 0 \text{ und } \Psi(h) = \Psi_1 = h \quad (2.36)$$

gewählt. Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung kann hier Ψ_1 beliebig gewählt werden, da dies nur die Normierung der Wellenfunktion betrifft.

Für Wellenfunktionen mit gerader Parität sind die Anfangsbedingungen nicht so trivial wählbar, jedoch lässt sich infolge der Symmetrie ein Ausdruck aus der Rekursionsformel des Numerov-Algorithmus gewinnen.

Da bei gerader Parität kein Knoten im Ursprung vorliegen kann², kann $\Psi_0 = 1$ gesetzt werden. Auch hier ist, angesichts der Linearität der Schrödingergleichung, Ψ_0 beliebig wählbar. Aus der Rekursionsformel (2.35) folgt nun

$$\Psi_1 = \frac{2\Psi_0 - \frac{h^2}{12} (10F(0)\Psi_0 + F(-h)\Psi(-h)) - \Psi(-h)}{1 + \frac{h^2}{12}F(h)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.37)$$

²Wenn ein Knoten im Ursprung vorliegen würde, könnte dies bei gerader Parität keine einfache Nullstelle sein. Dies wurde aber bereits ausgeschlossen.

für die zweite Anfangsbedingung. Durch die gerade Parität der Wellenfunktion, ist jedoch $\Psi(-h) = \Psi(h) = \Psi_1$. Zusätzlich ergibt sich aus der Symmetrie des Potentials $F(-x) = F(x)$. Insgesamt gilt für die Anfangsbedingungen

$$\Psi_0 = 1 \text{ und } \Psi_1 = \frac{1 - \frac{5h^2}{12} F(0)}{1 + \frac{h^2}{12} F(h)} \Psi_0 + \mathcal{O}(h^6), \quad (2.38)$$

was einen geschlossenen Ausdruck darstellt, welcher nur von der Energie abhängig ist.

2.4.2 Randbedingungen

Neben den Anfangsbedingungen müssen Randbedingungen eingeführt werden. Der Grund hierfür liegt wiederum in der Schrödinger-Gleichung, weil die Lösungen zu einem beliebigen Energieeigenwert $E \in \mathbb{R}$ nicht unbedingt normierbar sind. Diese widersprechen aber der Normierbarkeitsbedingung und sind damit physikalisch nicht sinnvoll.

Die physikalisch sinnvollen Wellenfunktionen der gebundenen Zustände sind Elemente des Raums L^2 , der Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen. Diese Lösungen konvergieren für $x \rightarrow \pm\infty$ gegen Null und sind damit problemlos normierbar. Durch diese zusätzliche Forderung der bereits angesprochenen Normierungsbedingung, werden die Energieeigenwerte eingeschränkt, was zu den bekannten diskreten Energieniveaus gebundener Zustände führt.

Durch die endliche Genauigkeit, die mit einem numerischen Verfahren erreicht werden kann, können die Energieeigenwerte nur eingegrenzt und nicht exakt berechnet werden. Dies führt aber dazu, dass die durch den Numerov-Algorithmus berechneten Wellenfunktionen nicht im unendlichen verschwinden, sondern ein anderes Verhalten zeigen.

Dazu betrachte man die Schrödinger-Gleichung (2.28). Mit den für das Programm zugelassenen Potentialen, ist $F(x) < 0$ für $x \rightarrow \infty$ eines gebundenen Zustands. Daher besitzen $\Psi(x)$ und $\Psi^{(2)}(x)$ gemäß der Schrödinger-Gleichung im Unendlichen dasselbe Vorzeichen, woraus folgt, dass hier die Lösung $\Psi(x)$ von der x -Achse weg gekrümmmt ist (vgl. [Nol09b]).

Für den exakten Energieeigenwert E führt dies auf ein exponentielles Abklingen in diesem Bereich.

Wird nun die Energie etwas zu klein gewählt, so ist die Krümmung so stark, dass diese Lösung für $x \rightarrow \infty$ divergiert. Im umgekehrten Fall einer etwas zu großen Energie, bildet die Lösung einen weiteren Knoten und divergiert mit anderem Vorzeichen. Schematisch ist dieses Verhalten in Abbildung 2.1 dargestellt.

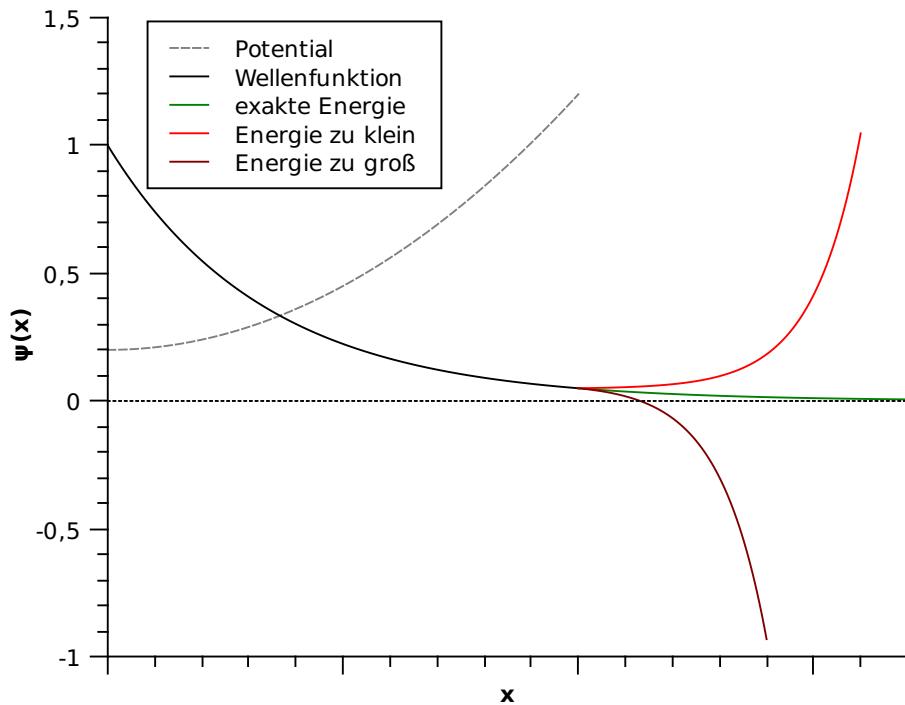


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Verhalten der nicht normierten Lösung der Schrödinger-Gleichung bei Variation des Energieeigenwertes E im Bereich $F(x) < 0$.

2.4.3 Schießverfahren und Bisektion

Dem Programm können, neben dem Potential, das Intervall der Quantenzahl der zu berechnenden Energieeigenwerte, sowie die dabei zu erreichende relative Genauigkeit übergeben werden. Zu Beginn wird das Konvergenzverhalten für $x \rightarrow \infty$ ermittelt und damit die obere Grenze für die Energie festgelegt. Der Anfangswert für den ersten Energieeigenwert wird zwischen Null und dieser oberen Grenze gelegt.

Um nun die gesuchten Energieeigenwerte zu berechnen, wird ein sogenanntes Schießverfahren angewendet. Anhand der Quantenzahl wird die Parität der Wellenfunktion ermittelt und die Anfangswerte berechnet. Mit Hilfe des Numerov-Algorithmus wird anschließend Schrittweise die Wellenfunktion für $x_i = h \cdot i \in [0, \infty)$ bestimmt.

Aus dem Knotensatz und dem Verhalten der Lösung der Schrödinger-Gleichung für $x \rightarrow \infty$ folgen Abbruchbedingungen für die Iteration. Die erste Bedingung ist, dass die Knoten der Wellenfunktion gleich der Quantenzahl sein muss³. Es ergeben sich daraus zwei Fälle:

³Der Grundzustand ist mit der Quantenzahl $n = 0$ belegt und besitzt keinen Knoten. Die Anzahl der Knoten ist demnach gleich n .

1. Es werden $n + 1$ Knoten registriert. Der Energieeigenwert ist zu hoch gewählt.
2. Die Wellenfunktion divergiert bei n oder weniger Knoten. Der Energieeigenwert ist zu niedrig gewählt.

Das Ergebnis ergibt eine neue obere bzw. untere Schranke für den Energieeigenwert. Jetzt kann durch Halbierung des Intervalls zwischen oberer und unterer Grenze ein weiteres Mal die Wellenfunktion berechnet werden, woraus erneut eine obere bzw. untere Grenze für den Energieeigenwert folgt. Durch sukzessives Durchführen dieser beiden Schritte, kann der Energieeigenwert immer weiter eingegrenzt werden. Dies ist die sogenannte Bisektion bzw. das Intervallhalbierungsverfahren. Das in diesem Zusammenhang wiederholte Berechnen der Wellenfunktion mit Hilfe des iterativen Numerov-Algorithmus stellt das Schießverfahren dar.

Dieser Vorgang wird abgebrochen, sobald die relative Breite des Bisektionsintervalls unter der anzugebenden relativen Genauigkeit liegt. Die ermittelte Energie bildet im Weiteren die untere Grenze für den Energieeigenwert zur Quantenzahl $n + 1$.

2.4.4 Implementierung

Das Programm, welches das beschriebene Lösungsverfahren implementiert, besitzt als Eingabe eine Parameter-Datei, in der neben dem Potential verschiedene Parameter übergeben werden können. Diese gliedern sich in drei Punkte:

Das Potential Dieses kann in Form der C++ Syntax angegeben werden. Eine genaue Beschreibung, welche Funktionen unterstützt werden und welche Form der Potentialausdruck haben muss, kann der Anleitung entnommen werden.

Parameter Innerhalb des Potentialausdrucks können Parameter benutzt werden. Sind dazu sowohl das Intervall als auch die Schrittzahl in diesem definiert, wird dies vom Programm automatisch durchfahren. Wenn es mehrere Parameter gibt, werden alle Kombinationen realisiert.

Konstanten Es ist möglich Konstanten zu definieren, die im Potentialausdruck benutzt werden.

Die Energieeigenwerte Durch Angabe der niedrigsten und höchsten Quantenzahl wird das Intervall definiert, für das die Energieeigenwerte berechnet werden sollen.

Relative Genauigkeit Als Abbruchbedingung der Bisektion wird eine obere Schranke für den relativen Fehler, d.h. für die relative Breite des Bisektionsintervalls angegeben. Hierauf wird im Rahmen des Vergleichs mit analytischen Lösungen noch einmal eingegangen.

Ausgabeformat Es existieren zwei unterschiedliche Ausgabeformate für die Energieeigenwerte, sortiert nach Quantenzahl oder Parameter.

Die Wellenfunktion In diesem Teil werden Informationen für die Wellenfunktionen angegeben, die im Zuge des Numerov-Algorithmus iterativ berechnet und gegebenenfalls mit ausgegeben werden.

Schrittweite Dies entspricht der Schrittweite h im Numerov-Algorithmus.

Ausgabe Es ist möglich die Wellenfunktionen optional ausgeben zu lassen.

Punkte Die ausgegebenen Wellenfunktionen werden für die angegebene Anzahl an Punkten gespeichert.

Die Implementierung des Lösungsverfahrens in C++ teilt sich in mehrere Klassen auf. Eine schematische Darstellung der Beziehungen und Aufgaben der einzelnen Klassen ist in Abbildung 2.2 zu sehen.

Die Aufgaben der einzelnen Klassen soll im Folgenden erläutert werden.

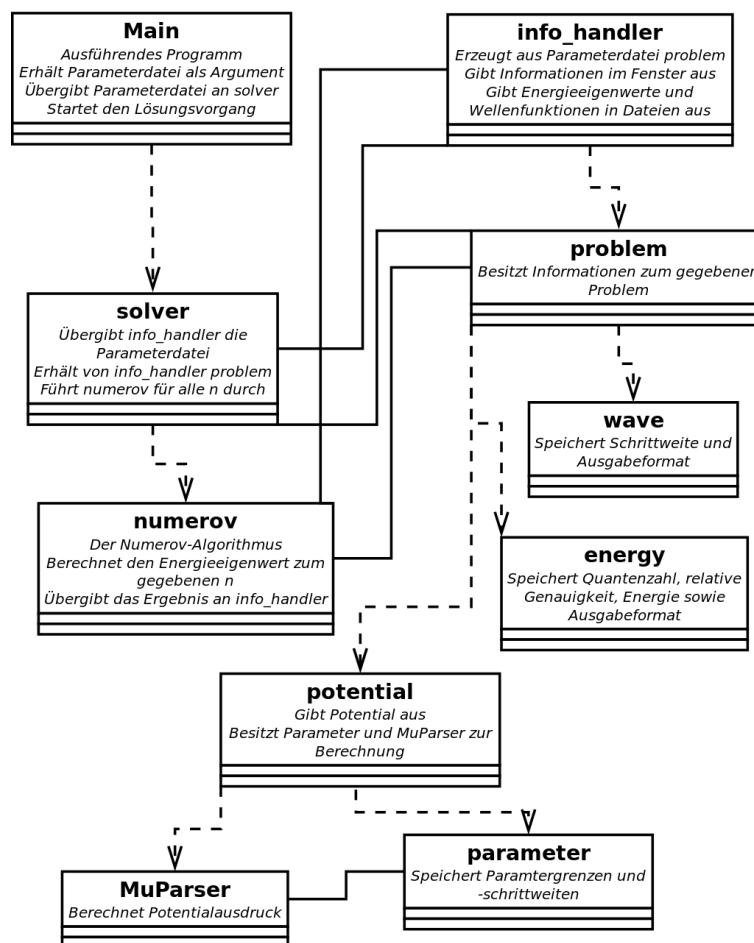


Abbildung 2.2: Schematisches Diagramm zwischen den einzelnen Klassen des implementierten Lösungsverfahrens. Die gestrichelten Linien deuten die Herkunft des zur Laufzeit erstellten Objekts der Klasse an. Die durchzogenen Linien zeigen die Zugriffswege zwischen den einzelnen Objekten.

Main Der Anstiegspunkt des Programms ist, wie immer in einem C++ Programm, die `main` Funktion. Diese nimmt per Kommandozeilenargument den Dateinamen der Parameter-Datei an. Wird kein Dateiname übergeben, öffnet das Programm die Datei `parameter.ini`. Der erzeugte Dateistream wird an ein neu erzeugtes Objekt des Typs `solver` übergeben, und dieses gestartet.

solver Das Objekt dieser Klasse nimmt den Dateinamen entgegen und erhält daraus mit Hilfe der statischen Klasse *info_handler* ein Objekt des Typs *problem*. Dieses speichert alle relevanten Informationen für das numerische Lösungsverfahren.

Es wird anschließend ein Objekt des Typs *numerov* erzeugt, welches für das Intervall der Quantenzahlen und Parameter angewiesen wird die Energiedifferenzen zu berechnen. Sind alle Quantenzahlen und Parameter durchfahren, stoppt das Programm.

problem Die Informationen, die zur Berechnung der Wellenfunktion und damit der Energieeigenwerte benötigt werden, sind gänzlich im Objekt dieser Klasse gespeichert. Sie definiert zudem die Funktion $F(x)$ der Schrödingergleichung (2.28) mit den Konstanten $\hbar = m = 1$. Das Objekt des Typs *problem* besitzt Objekte der Klassen *energy*, *wave* und *potential*.

Die Klasse *energy* beinhaltet die Intervallgrenzen der Quantenzahl, die obere Schranke der relativen Genauigkeit, die momentane Energie und die momentane Quantenzahl. Zusätzlich wird das Ausgabeformat der Energieeigenwerte gespeichert. Die Klasse *wave* speichert die Schrittweite des Numerov-Algorithmus, sowie ob und wie die Wellenfunktion ausgegeben werden soll.

potential Das Potential wird mit etwaigen Parametern im Objekt des Typs *potential* gespeichert. Dieses Objekt speichert die Informationen zu den Parametern in eigenen Objekten des Typs *parameter*. Der Potentialausdruck wird als Zeichenkette einem Objekt des Typs *mu::Parser* der MuParser Bibliothek übergeben.

Diese quelloffene Bibliothek ist in der Lage Ausdrücke in Form von Zeichenketten zu mathematischen Ausdrücken zu übersetzen und diese zu berechnen. Dadurch können, im Rahmen der von der Bibliothek unterstützten Funktionen, beliebige Potentiale übergeben werden.

numerov In diesem Teil des Programms liegt das bereits beschriebene Lösungsverfahren, welches anhand des Numerov-Algorithmus die Energieeigenwerte berechnet. Dazu greift es auf die Informationen im Objekt *problem* zurück. Die zentralen Abbruchbedingungen sind insgesamt in drei Fälle unterteilt, wobei y_1 den auf y_0 folgenden Wert der Iteration darstellt:

- ```
1. if (y_1 == std::numeric_limits<double>::infinity()
 || y_1 == -std::numeric_limits<double>::infinity())
```

Die Iteration führt unstetig zur numerischen Darstellung der Unendlichkeit. Es liegt ein numerisch sehr ungünstig gewählter Energiewert vor. Zur Lösung des Problems wird dieser leicht variiert, wobei die Intervallgrenzen der Bisektion unangetastet bleiben.

2. `if (((y_1 < 0) != (y_0 < 0))  
&& (++roots > prob->en->n))`

Es wird durch einen Vorzeichenwechsel der Werte ein weiterer Knoten registriert. Ist die Anzahl der Knoten *roots* nun größer als die Quantenzahl *n* liegt ein zu großer Energiewert vor. Die obere Grenze des Bisektionsintervalls wird auf den momentanen Energiewert gesetzt.

3. `if (((y_1 > 1e3) && y_0 > 0)  
|| ((y_1 < -1e3) && y_0 < 0))`

Übersteigt die Iteration die feste Grenze von  $|y_1| = 10^3$ , wird eine divergierende Wellenfunktion angenommen. Diese obere Schranke zeigte sich in allen Modelfällen als ausreichend. Aufgrund der Wahl der Anfangsbedingungen, sollte die Wellenfunktion eine Normierung außerhalb dieser Größenordnung besitzen. Die zweite Bedingung soll sicherstellen, dass es sich nicht um ein willkürliches Springen in Folge eines pathologischen Energiewerts handelt. Letzteres läuft im nächsten Iterationsschritt auf den 1. Fall hinaus.

Die Energieeigenwerte und gegebenenfalls die Wellenfunktionen werden mittels des Objekts *info\_handler* ausgegeben.

# 3 Vergleich mit analytischen Lösungen

Damit eine Aussage über die Genauigkeit und numerische Stabilität des Programms getroffen werden kann, sollen in diesem Teil die numerisch berechneten Lösungen mit verschiedenen analytischen Lösungen verglichen werden.

Für die zu berechnenden Energieeigenwerte wird eine obere Schranke für die relative Genauigkeit  $\frac{\Delta E}{E}$  als Parameter angegeben, wodurch das Programm beim unterschreiten dieser Grenze abbricht. Ist  $E_{max}$  die obere und  $E_{min}$  die untere Grenze für den Energieeigenwert, so berechnet das Programm die relative Genauigkeit  $\frac{\Delta E}{E}$  über folgenden Ausdruck:

$$\frac{\Delta E}{E^{num}} = \frac{E_{max} - E_{min}}{E^{num}} \quad \text{mit} \quad E^{num} = \frac{E_{max} + E_{min}}{2} \quad (3.1)$$

Konvergiert die Bisektion gegen den Energieeigenwert, so stellt die als Parameter angegebene Genauigkeit eine obere Schranke dar. Ob und bis zu welchem Grad die Bisektion zum gefragten Energieeigenwert konvergiert, soll anhand verschiedener analytischer Lösungen untersucht werden.

Dazu wird die relative Abweichung zur analytischen Lösung berechnet und mit dem numerisch bestimmten Fehler verglichen. Der numerisch bestimmte Fehler

$$\Delta E^{num} = \frac{E_{max} - E_{min}}{2} \quad (3.2)$$

folgt aus der Differenz aus oberer und unterer Grenze des Bisektionsintervalls. Der Energieeigenwert sollte damit im Bereich  $E^{num} \pm \Delta E^{num}$  liegen. Den tatsächlichen Fehler

$$\Delta E^{ana} = |E^{ana} - E^{num}| \quad (3.3)$$

gewinnt man aus der betragsmäßigen Differenz aus analytisch exaktem Energieeigenwert  $E^{ana}$  und numerisch bestimmtem  $E^{num}$ . Wie aus Gleichung (3.1) hervorgeht, liegt der numerisch bestimmte Wert  $E^{num}$  immer auf der Hälfte im Intervall zwischen oberer und unterer Grenze des Bisektionsintervalls.

Wird jetzt der relative Fehler bezüglich der analytischen Lösung

$$r_{rel}^{ana} = \frac{\Delta E^{ana}}{E^{ana}} \quad \text{bzw.} \quad r_{rel}^{num} = \frac{\Delta E^{num}}{E^{ana}} \quad (3.4)$$

berechnet, können beide Abweichungen miteinander verglichen werden. Eine vernünftige Konvergenz liegt vor, so lange  $r_{rel}^{ana} \leq r_{rel}^{num}$  gilt. Sobald dies nicht mehr

der Fall ist, liegen die berechneten Energieeigenwerte nicht mehr im numerisch bestimmten Fehlerintervall und es werden keine verlässlichen Werte mehr generiert.

Zudem werden exemplarisch die analytisch gewonnenen Wellenfunktionen mit den numerisch bestimmten im qualitativen Verlauf verglichen. Auf eine quantitative Diskussion der Abweichungen zur analytischen Wellenfunktion wird verzichtet, da der Fokus auf der Bestimmung der Energieeigenwerte liegt.

## 3.1 Der Harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator bildet das Standardproblem der Quantenmechanik und dessen Modell ist in vielen Bereichen der Physik eine wichtige und nützliche Näherung. Das Problem ist analytisch exakt lösbar, wobei die Lösung als bekannt vorausgesetzt wird. Das Potential ist bereits aus der klassischen Mechanik bekannt und ergibt sich aus einer linear im Ort ansteigenden Kraft:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3.5)$$

Die Frequenz  $\omega$  sowie die Masse  $m$  sind Konstanten und werden zu  $m = \omega = 1$  gewählt, zumal diese eine bloße Skalierung bewirken. Das Potential vereinfacht sich daher zu

$$V(x) = \frac{x^2}{2}. \quad (3.6)$$

### 3.1.1 Das Spektrum

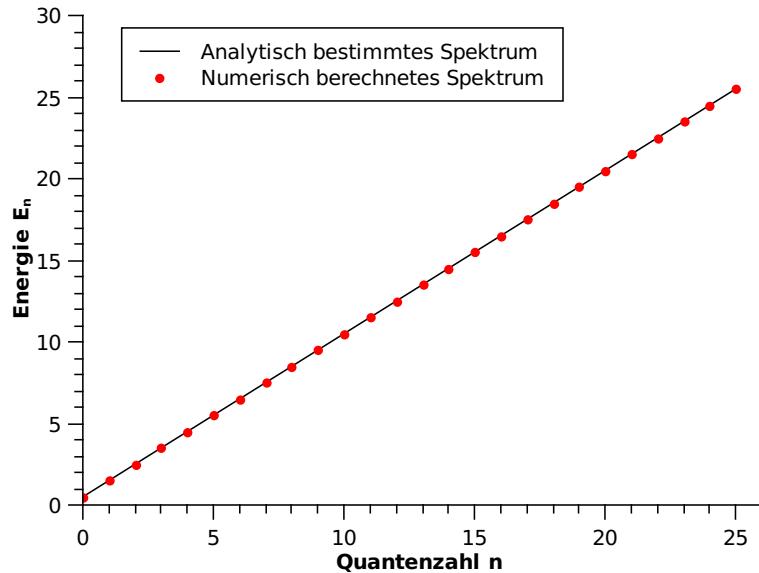
Das gesamte Spektrum der Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators ist diskret, da es sich ausschließlich um gebundene Zustände handelt. Es ergibt sich zu:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.7)$$

Unter den vereinfachten Konstanten  $\hbar = \omega = 1$  ergibt sich als Vergleich zum numerisch ermittelten Spektrum:

$$E_n = n + \frac{1}{2} \quad (3.8)$$

Wie man in Abbildung 3.1 erkennen kann, folgt das numerisch berechnete Spektrum dem linearen Verlauf des analytischen Spektrums. Die Abweichungen von diesem sollen im Folgenden für verschiedene relative Genauigkeiten  $\frac{\Delta E}{E}$  näher betrachtet werden.



**Abbildung 3.1:** Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmtem Spektrum des harmonischen Oszillators für Quantenzahlen  $n \in [0, 25]$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet.

### 3.1.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers

Die als Parameter übergebene obere Schranke der relativen Genauigkeit  $\frac{\Delta E}{E}$  führt dazu, dass die relative Genauigkeit der einzeln numerisch bestimmten Energieniveaus unter diese Grenze fällt. Die, aus der Hälfte von oberer und unterer Grenze des Bisektionsintervalls, bestimmten Fehlerintervalle sollten wiederum eine obere Schranke für den tatsächlichen Fehler darstellen. Dies ist aber nur der Fall, wenn die Bisektion präzise zum analytisch korrekten Energieniveau konvergiert.

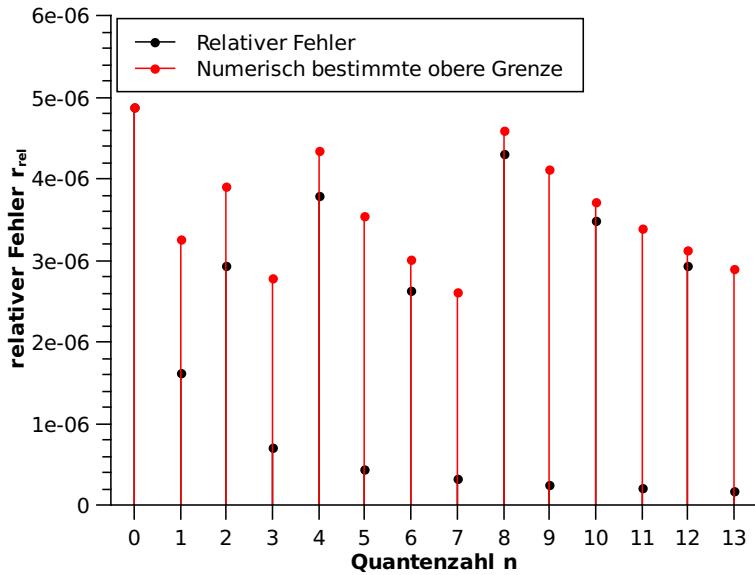
Dazu betrachte man die in Gleichung (3.4) eingeführten relativen Abweichungen. Wie bereits angesprochen, muss für diese gelten:

$$r_{rel}^{num} \geq r_{rel}^{ana} \quad (3.9)$$

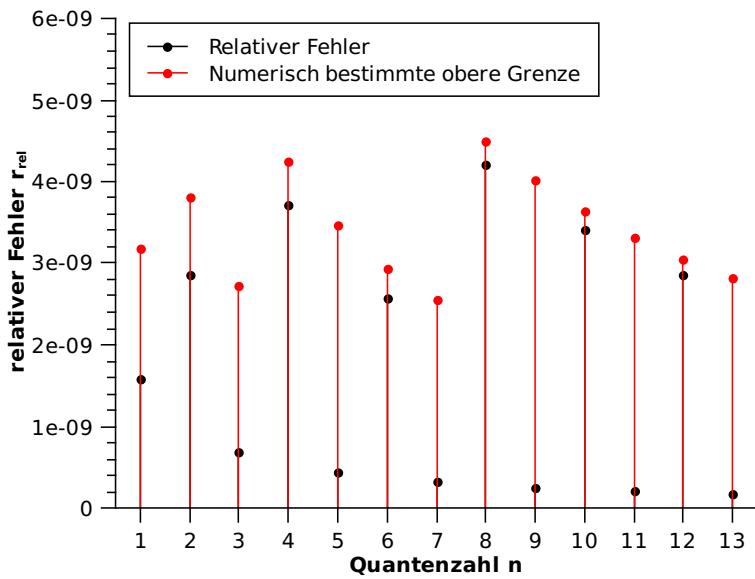
Ist dies nicht der Fall, liegt der analytisch exakte Energieniveau außerhalb des vom Programm bestimmten Fehlerintervalls.

In Abbildung 3.2 ist sind die relativen Abweichungen für  $n \in [0, 13]$  und  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$  gezeigt. Die Schrittweite wird im Folgenden immer zu  $h = 10^{-5}$  gewählt.

Für den Grundzustand ergibt sich hier der unwahrscheinliche Fall der Gleichheit von Ungleichung (3.9). Für die restlichen Quantenzahlen gilt die Ungleichung, und der exakte Energieniveau liegt im Fehlerintervall des numerisch bestimmten Werts.



**Abbildung 3.2:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}(h = 10^{-5})$ .

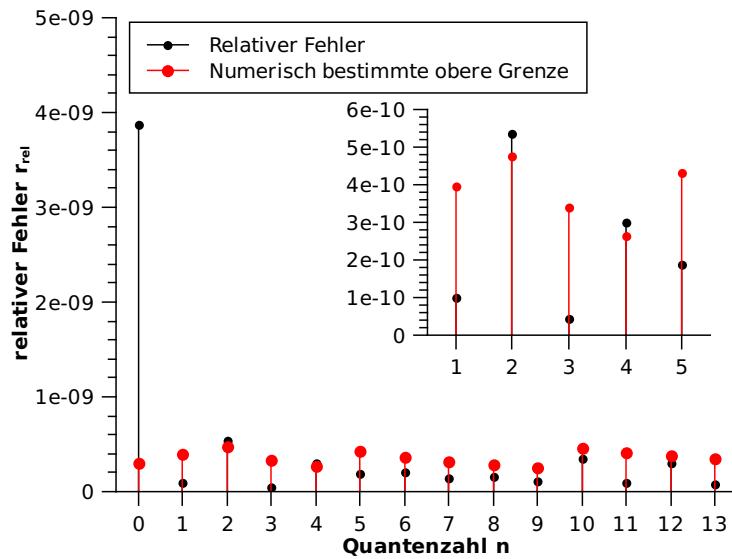


**Abbildung 3.3:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}(h = 10^{-5})$ .

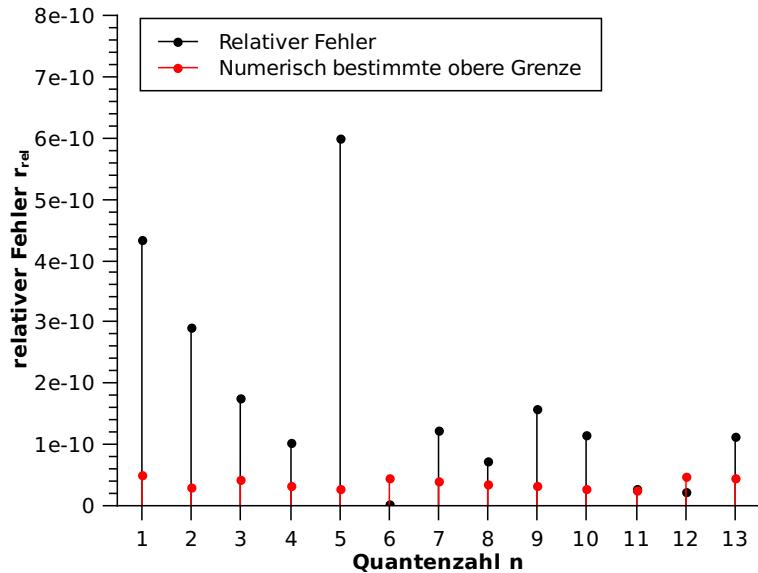
In Abbildung 3.3 ist  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ . Auch hier zeigt sich die Übereinstimmung der Ungleichung. Wenn man nun auf  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}$  sinkt, so ergibt dies die in Abbildung 3.4 gezeigten relativen Abweichungen.

Wie gut zu erkennen ist, weicht die relative Abweichung des Grundzustandes schon stark ab. Der Energieeigenwert liegt außerhalb des numerisch bestimmten Fehlerintervalls. Auch für höhere Quantenzahlen ist Ungleichung (3.9) nicht mehr erfüllt.

Die Abweichungen treten zuerst für gerade Quantenzahlen auf. Dies folgt aus der zusätzlichen Ungenauigkeit der Anfangsbedingungen für gerade Zustände. In Abbildung 3.5 zeigt sich jedoch, dass für  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}$  auch für ungerade Quantenzahlen die Ungleichung nicht mehr erfüllt ist.



**Abbildung 3.4:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}(h = 10^{-5})$ .



**Abbildung 3.5:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10} (h = 10^{-5})$ .

### 3.1.3 Die Wellenfunktionen

Die Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators sind die Hermiteschen Funktionen:

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (3.10)$$

$$= \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}x^2} H_n(x) \quad (3.11)$$

Hierbei bilden die  $H_n(x)$  die sogenannten Hermite-Polynome:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (3.12)$$

Exemplarisch ergibt sich für das Hermite-Polynom dritter Ordnung daher

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad (3.13)$$

und damit für die ungerade Wellenfunktion  $\Psi_3(x)$  zum Energieeigenwert  $E_3$

$$\Psi_3(x) = \frac{8x^3 - 12x}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (3.14)$$

### 3.1 Der Harmonische Oszillator

Diese ist in Form der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD)  $\rho = |\Psi(x)|^2$  in Abbildung 3.6 der numerisch berechneten gegenübergestellt.

Als zweites Beispiel gilt mit dem Hermit-Polynom vierter Ordnung

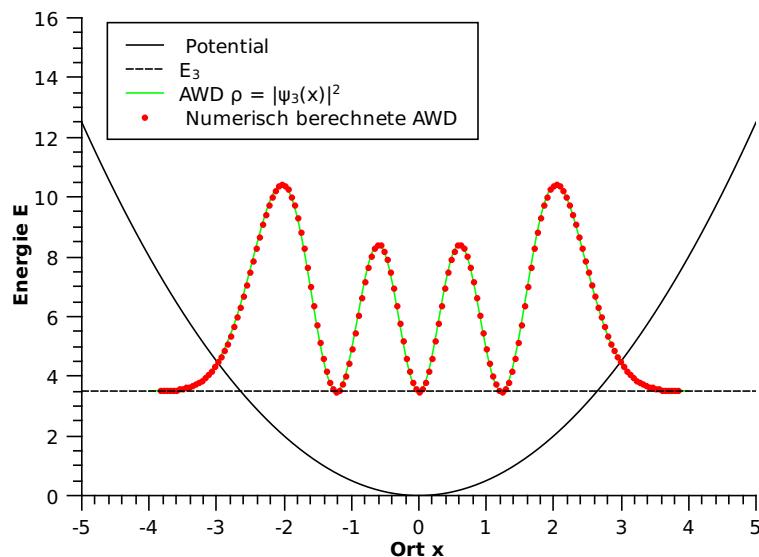
$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12 \quad (3.15)$$

für die gerade Wellenfunktion  $\Psi_4(x)$  zum Energieniveau  $E_4$

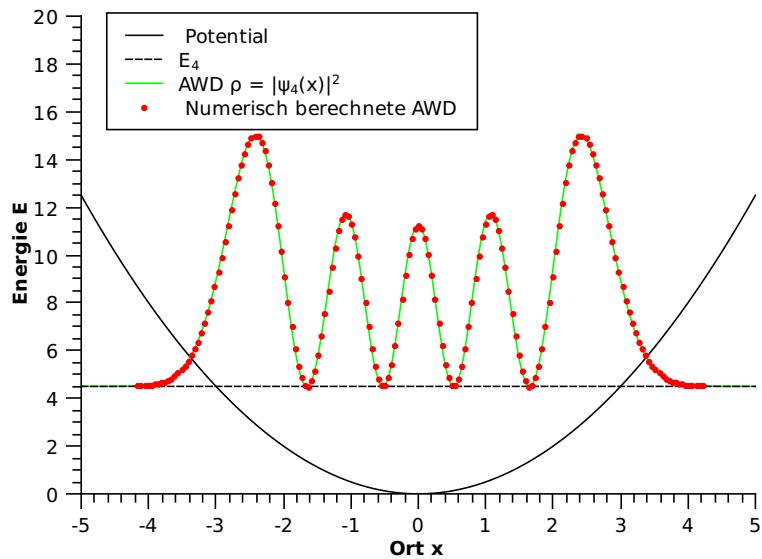
$$\Psi_4(x) = \frac{16x^4 - 48x^2 + 12}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (3.16)$$

Der Vergleich in Form der AWD ist in Abbildung 3.7 dargestellt.

Der qualitative Verlauf entspricht in beiden Fällen der analytischen Lösung. Zu Darstellungszwecken wurde nur eine kleine Menge an Punkten der numerischen Lösung abgebildet.



**Abbildung 3.6:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) als Betragsquadrat der Wellenfunktion zum Energieniveau  $E_3$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau  $E_3$  angehoben wurde.



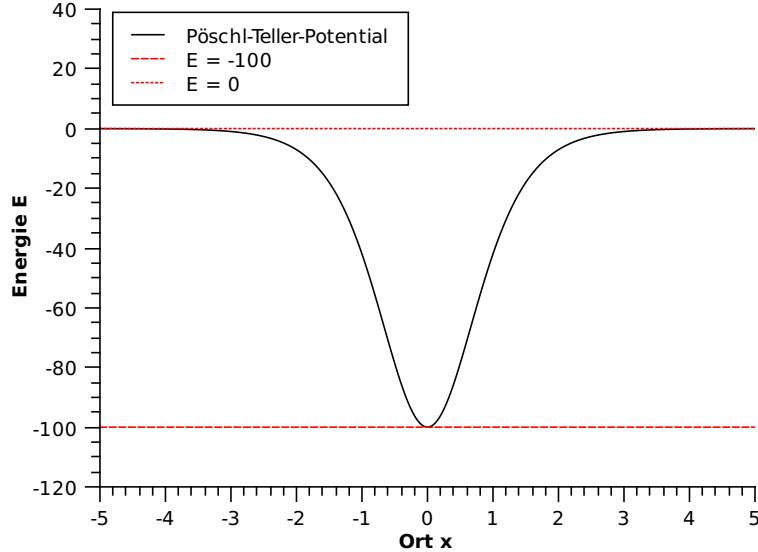
**Abbildung 3.7:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert  $E_4$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau  $E_4$  angehoben wurde.

## 3.2 Das Pöschl-Teller-Potential

Das Pöschl-Teller-Potential gehört zu den wenigen Potentialen, zu denen die Schrödinger-Gleichung gelöst werden kann. Die symmetrische Form des im Allgemeinen nicht symmetrischen Potentials wird in der Literatur als modifiziertes Pöschl-Teller-Potential bezeichnet. Im Folgenden ist mit Pöschl-Teller-Potential immer die symmetrische Form gemeint. Diese ergibt sich in der üblichen Darstellung zu

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} \quad \text{mit} \quad V_0 > 0 \quad (3.17)$$

und besitzt die Form einer Mulde, welche nach Außen gegen Null konvergiert. Die Konstante  $V_0$  gibt dabei die Tiefe der Mulde an (vgl. Abb. 3.8).



**Abbildung 3.8:** Verlauf des modifizierten Pöschl-Teller-Potentials für  $V_0 = -100$  und  $\alpha = 1$ .

Da das Potential für  $x \rightarrow \pm\infty$  nicht gegen Unendlich, sondern gegen eine endliche Konstante geht, existiert nur eine endliche Anzahl von gebundenen Zuständen. Diese Anzahl ist von der Tiefe der Mulde, und damit von der Konstante  $V_0$ , abhängig.

Die Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} \right) \Psi(x) = 0 \quad (3.18)$$

lässt sich in die Form der hypergeometrischen Differentialgleichung überführen (s. [LL81a]). Aus der Normierungsbedingung für die Lösungen dieser Differentialgleichung geht hervor, dass die Quantenzahl  $n$  eine obere Schranke besitzen muss:

$$n < \sqrt{\frac{2mV_0}{\alpha^2\hbar^2} - \frac{1}{4}} + \frac{1}{2} \quad (3.19)$$

Für eine genaue Diskussion des analytischen Lösungsverfahrens wird hier auf die Literatur ([LL81a, Flü94]) verwiesen. Die Konstanten werden zu  $\alpha = m = \hbar = 1$  gewählt.

Für das Programm muss  $V(x) \geq 0$  gelten. Hierfür wird deshalb das Potential um die Muldentiefe  $V_0$  in den positiven Energiebereich verschoben. Es ergibt sich demnach insgesamt für das untersuchte Potential:

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2(x)} + V_0 \quad (3.20)$$

Exemplarisch soll im Weiteren die Konstante  $V_0 = 100$  betragen. Daraus folgt für die Quantenzahl  $n$ :

$$n \leq 13 \quad (3.21)$$

Für die numerisch zu lösende Schrödinger-Gleichung folgt daraus:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + 2 \left( E + 100 - \frac{100}{\cosh^2(x)} \right) \Psi(x) = 0 \quad (3.22)$$

Die Verschiebung des Potentials führt zu einer konstanten Verschiebung der Energieeigenwerte. Wenn das Spektrum der Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials mit  $\tilde{E}_n$  bezeichnet wird, so resultiert für das Spektrum  $E_n$  des verschobenen Potentials:

$$E_n = \tilde{E}_n + V_0 = \tilde{E}_n + 100 \quad (3.23)$$

### 3.2.1 Das Spektrum

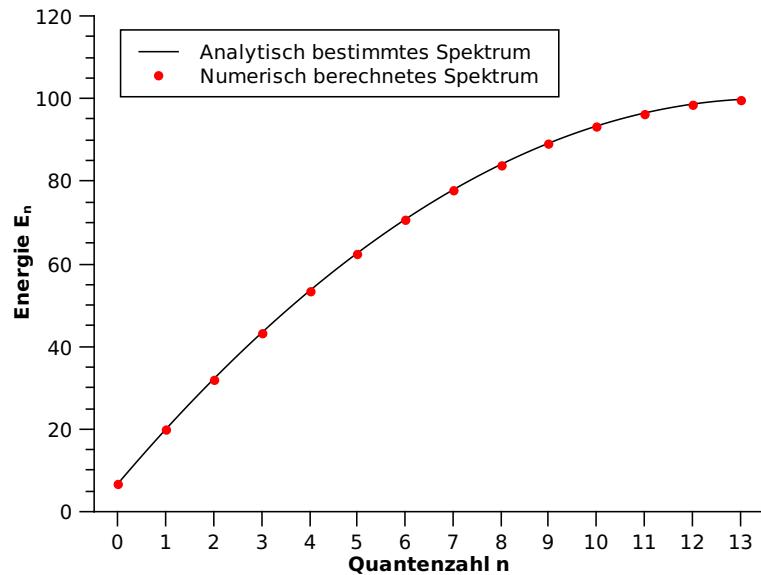
Das Spektrum der Energieeigenwerte ist für die gebundenen Zustände diskret und nach oben durch Gleichung (3.19) beschränkt. Aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung folgt ([LL81a]):

$$\tilde{E}_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \left[ \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}} - 1 - 2n \right]^2 \quad (3.24)$$

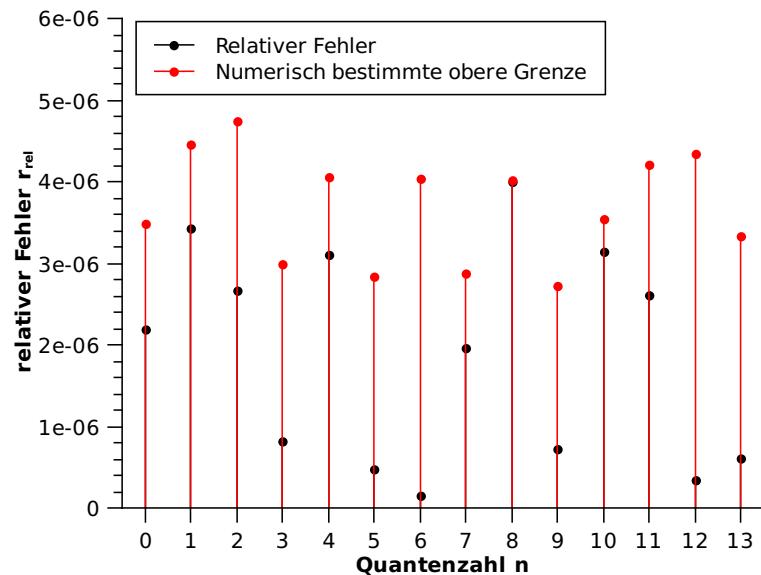
Mit der bereits angesprochenen Festlegung der Konstanten resultiert daraus für das numerisch bestimmte Spektrum:

$$E_n = -\frac{1}{8} \left( \sqrt{801} - 1 - 2n \right)^2 + 100 \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.25)$$

Wie in Abbildung 3.9 zu erkennen ist, folgt auch hier das numerisch berechnete Spektrum dem Verlauf des Analytischen. Die numerische Berechnung bricht für Quantenzahlen  $n > 13$  korrekterweise ab, da ab diesem Wert keine weiteren gebundenen Zustände mehr möglich sind.



**Abbildung 3.9:** Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmtem Spektrum des Pöschl-Teller-Potentials für Quantenzahlen  $n \in [0, 13]$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet.

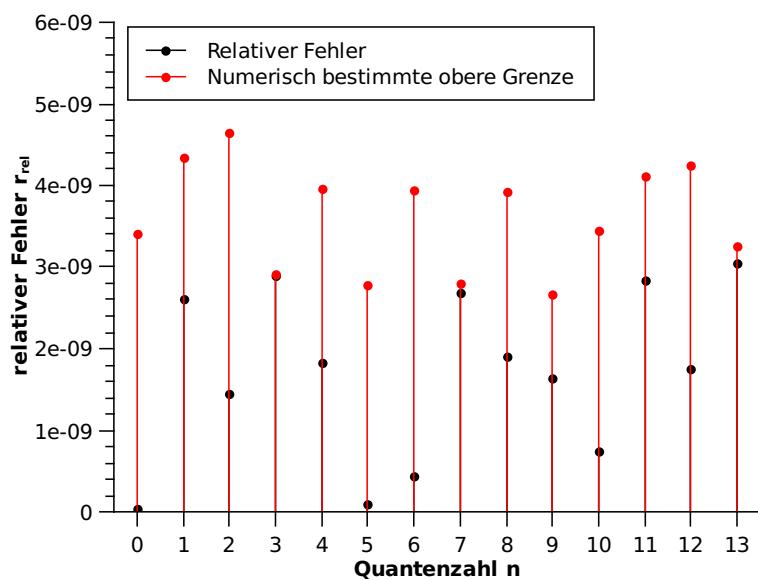


**Abbildung 3.10:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$  ( $h = 10^{-5}$ ).

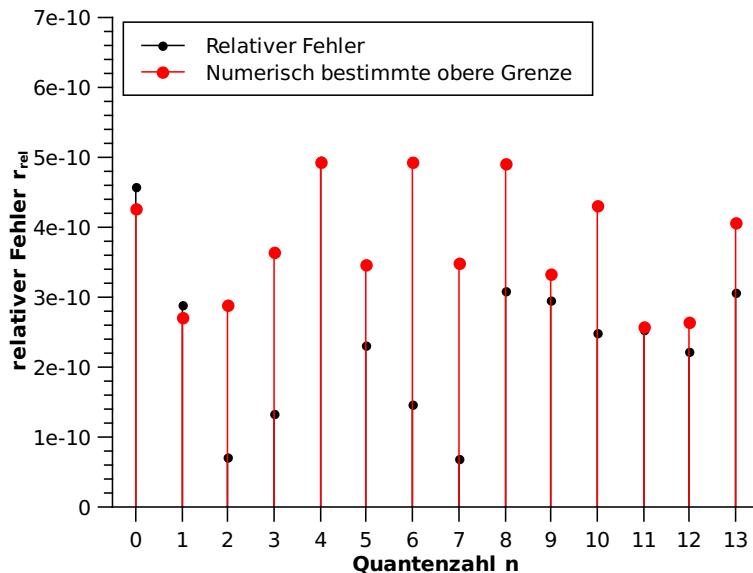
### 3.2.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers

Auch hier muss Ungleichung (3.9) erfüllt sein, damit die Energieeigenwerte innerhalb des numerisch bestimmten Fehlerintervalls liegen. Die Schrittweite wurde wieder zu  $h = 10^{-5}$  gewählt. Wie in den Abbildungen 3.10 und 3.11 zu erkennen, ist auch in diesem Fall bis  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$  die Ungleichung erfüllt.

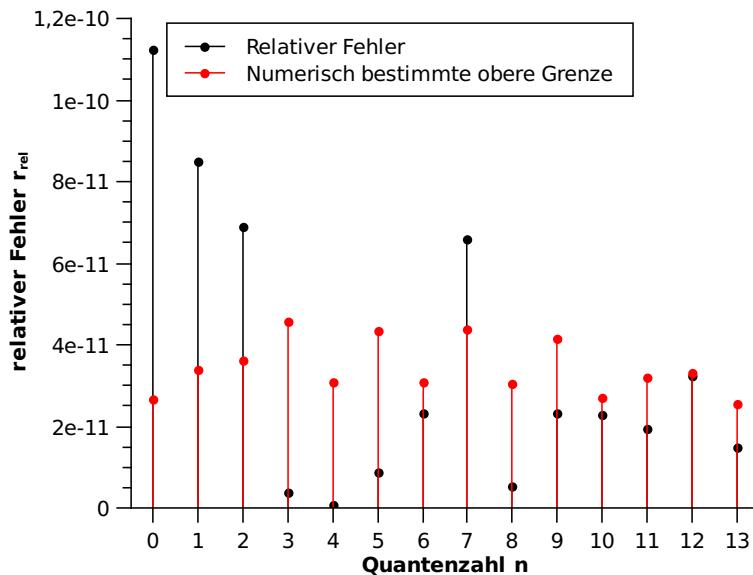
Bei weiterer Absenkung zu  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}$ , zeigt sich in Abbildung 3.12 eine erste Abweichung für den Grundzustand und den darauf Folgenden. Wie in Abbildung 3.12 zu sehen ist, ergeben sich für  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}$  weitere Energieeigenwerte, die numerisch nicht mehr korrekt eingegrenzt werden.



**Abbildung 3.11:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$  ( $h = 10^{-8}$ ).



**Abbildung 3.12:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}(h = 10^{-5})$ .



**Abbildung 3.13:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}(h = 10^{-5})$ .

### 3.2.3 Die Wellenfunktionen

Die in der Literatur ([LL81a]) diskutierte Lösung der Schrödinger-Gleichung führt auf Wellenfunktionen der Form

$$\Psi(x) = (1 - \xi^2)^{\frac{\epsilon_n}{2}} F \left[ \epsilon_n - s, \epsilon_n + s + 1, \epsilon_n + 1, \frac{1}{2} (1 - \xi) \right], \quad (3.26)$$

wobei  $F[\alpha, \beta, \gamma, z]$  die sogenannten hypergeometrischen Funktionen darstellen. Für die Substitutionen

$$\xi = \tanh(\alpha x) \quad (3.27)$$

$$\epsilon_n = \sqrt{-\frac{2m\tilde{E}_n}{\hbar\alpha}} = \sqrt{\frac{2m(100 - E_n)}{\hbar\alpha}} \quad (3.28)$$

$$s = \frac{1}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\alpha^2\hbar^2}} - 1 \right) \quad (3.29)$$

gilt  $\epsilon_n - s = -n$  mit  $n \in \mathbb{N}_0$ , damit die Wellenfunktionen der Normierungsbedingung gehorchen. Mit  $\epsilon_n > 0$  folgt daraus die bereits in Gleichung (3.19) angegebene obere Schranke der Quantenzahl  $n$ .

Insgesamt ergibt sich mit  $s = \epsilon_n + n$  für die Wellenfunktionen:

$$\Psi_n(x) = (1 - \tanh^2(\alpha x))^{\frac{\epsilon_n}{2}} F \left[ -n, 2\epsilon_n + n + 1, \epsilon_n + 1, \frac{1}{2} (1 - \tanh(\alpha x)) \right] \quad (3.30)$$

Die hypergeometrischen Funktionen vereinfachen sich für  $n \in \mathbb{N}_0$  zum Ausdruck (s. [LL81b]):

$$F[-n, \beta, \gamma, z] = \frac{z^{1-\gamma} (1-z)^{\gamma+n-\beta}}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)} \frac{d^n}{dz^n} \left[ z^{\gamma+n-1} (1-z)^{\beta-\gamma} \right] \quad (3.31)$$

Dies entspricht, bis auf konstante Vorfaktoren, den sogenannten Jacobi-Polynomen:

$$P_n^{(a,b)}(z) = \frac{(a+1)(a+2)\cdots(a+n)}{n!} \quad (3.32)$$

$$\cdot F \left[ -n, a+b+n+1, a+1, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}z \right] \quad (3.33)$$

$$= \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-z)^{-a} (1+z)^{-b} \frac{d^n}{dz^n} \left[ (1-z)^{a+n} (1+z)^{b+n} \right] \quad (3.34)$$

Bis auf eine Normierungskonstante  $N$  folgt für die Wellenfunktionen:

$$\Psi_n(x) = N \left(1 - \tanh^2(\alpha x)\right)^{\frac{\epsilon_n}{2}} P_n^{(\epsilon_n, \epsilon_n)} \left(\frac{1}{2} (1 - \tanh(\alpha x))\right) \quad (3.35)$$

Der Grundzustand

$$\Psi_0(x) = N_0 \left[1 - \tanh^2(x)\right]^{\frac{\sqrt{100-E_0}}{2}} \quad (3.36)$$

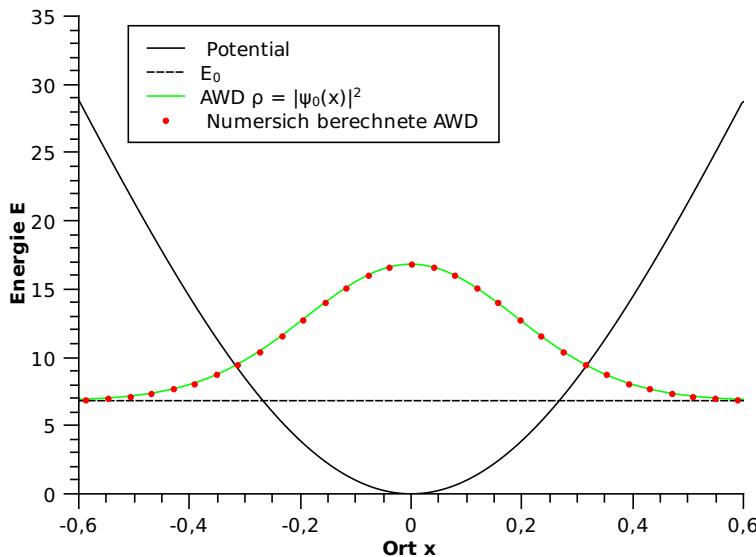
ist nun in Form der AWD mit der numerisch berechneten Wellenfunktion in Abbildung 3.14 dargestellt.

Für den Zustand der Quantenzahl  $n = 1$  ergibt sich

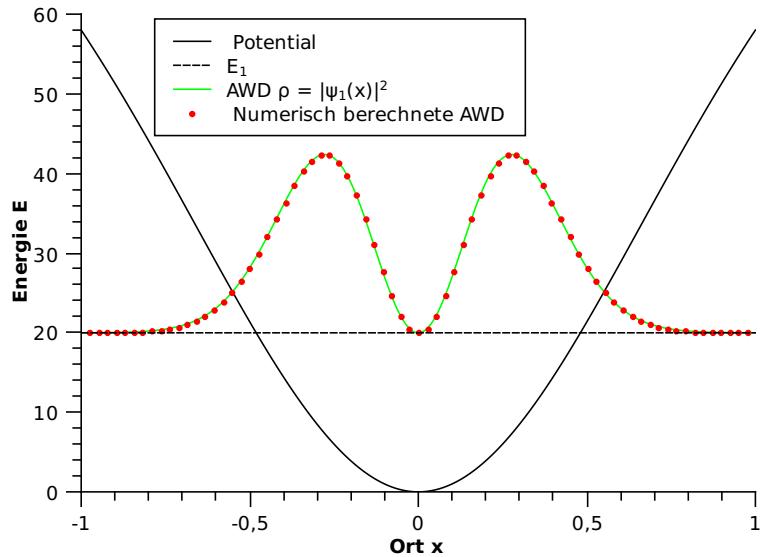
$$\Psi_1(x) = N_1 \tanh(x) \left[1 - \tanh^2(x)\right]^{\frac{\sqrt{100-E_1}}{2}}, \quad (3.37)$$

welcher in gleicher Form in Abbildung 3.15 der numerisch bestimmten Wellenfunktion gegenübergestellt ist.

In beiden Fällen lässt sich ein qualitativ übereinstimmender Verlauf feststellen. Die Menge an Punkten der numerischen Lösung wurde zu Darstellungszwecken reduziert.



**Abbildung 3.14:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert  $E_0$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau  $E_0$  angehoben wurde.



**Abbildung 3.15:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert  $E_1$  ( $h = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau  $E_1$  angehoben wurde.

### 3.3 Der unendlich hohe Potentialtopf

Der unendlich hohe Potentialtopf bildet einen Spezialfall unter den analytisch lösbarer Potentialen. Das Potential beschreibt einen Kasten mit undurchdringbaren Wänden:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < \frac{L}{2} \\ V_\infty = \infty & \text{für } |x| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.38)$$

Die Wellenfunktion besitzt an der unendlich hohen Sprungstelle zwangsläufig eine Nullstelle und ist an dieser Stelle nicht mehr stetig differenzierbar. Die erste Ableitung muss an dieser Stelle unstetig den Wert Null annehmen, da für  $|x| \geq \frac{L}{2}$  die Wellenfunktion gleich Null ist.

Dieser Umstand sowie die numerisch nicht exakt darstellbare unendlich hohen Potentialwände  $V_\infty$ , machen dieses Problem im Kontext der numerischen Lösung zu einem interessanten Diskussionsobjekt.

Die Lösung der zugehörigen Schrödinger-Gleichung wird hier als bekannt vorausgesetzt. Die Kastenbreite wird im Weiteren zu  $L = 2$  gewählt.

### 3.3.1 Das Spektrum

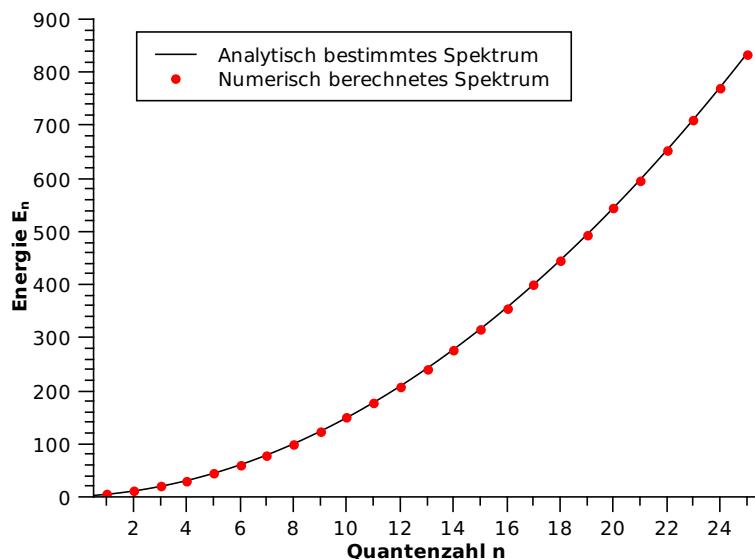
Das Spektrum besitzt einen quadratischen Verlauf und hängt von der Kastenbreite  $L$  ab, was auf den quadratischen Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl  $k$  zurückzuführen ist:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2} (n+1)^2 \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.39)$$

Mit den zu  $\frac{L}{2} = \hbar = m = 1$  gewählten Konstanten ergibt sich damit:

$$E_n = \frac{\pi^2}{8} (n+1)^2 \quad (3.40)$$

In Abbildung 3.16 ist das numerisch bestimmte Spektrum dem Analytischen gegenübergestellt. Es ist zu erkennen, dass der qualitative Verlauf übereinstimmt. Im Folgenden soll in Hinblick auf die endlich hohen Potentialwände  $V_\infty$  und die gewählte Schrittweite, die Abweichung vom analytischen Spektrum diskutiert werden.

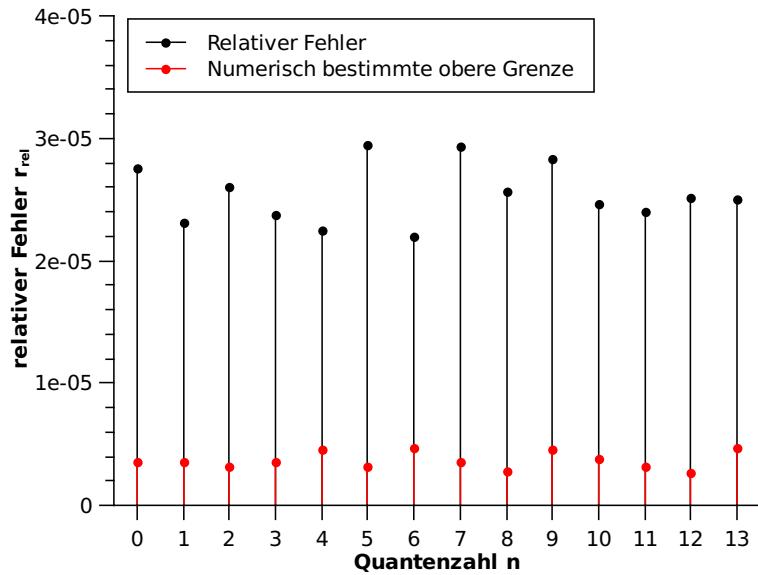


**Abbildung 3.16:** Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmten Spektrum des unendlichen hohen Potentialtopfs für Quantenzahlen  $n \in [0, 25]$  ( $\hbar = 10^{-5}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ,  $V_\infty = 10^{10}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet

### 3.3.2 Die Entwicklung des relativen Fehlers

Da für dieses Potential keine korrekte numerische Darstellung gewählt werden kann, muss man annehmen, dass Ungleichung (3.9) generell nicht eingehalten werden kann. Die obere Schranke der relativen Genauigkeit wird auf  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$  festgelegt.

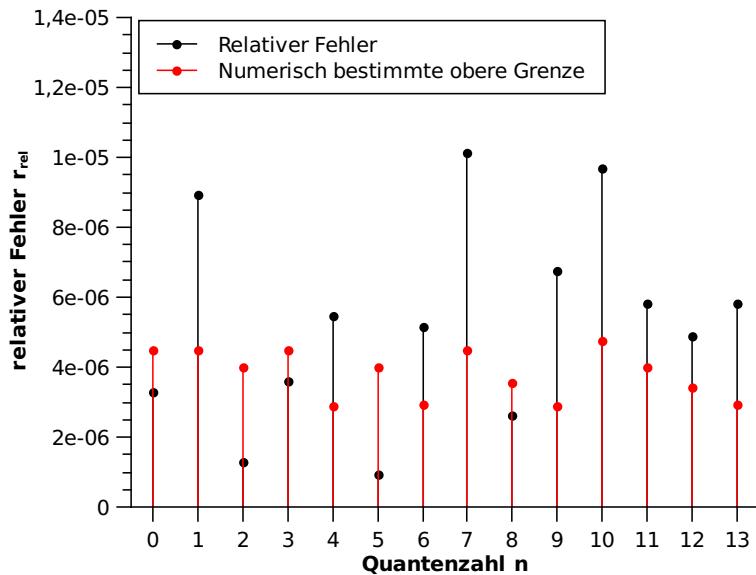
Berechnet man für die Quantenzahlen  $n \in [0, 13]$  die Energieeigenwerte mit einer Schrittweite  $h = 10^{-5}$  sowie eine Potentialwand von  $V_\infty = 10^{10}$ , so folgen daraus die in Abbildung 3.17 dargestellten relativen Abweichungen.



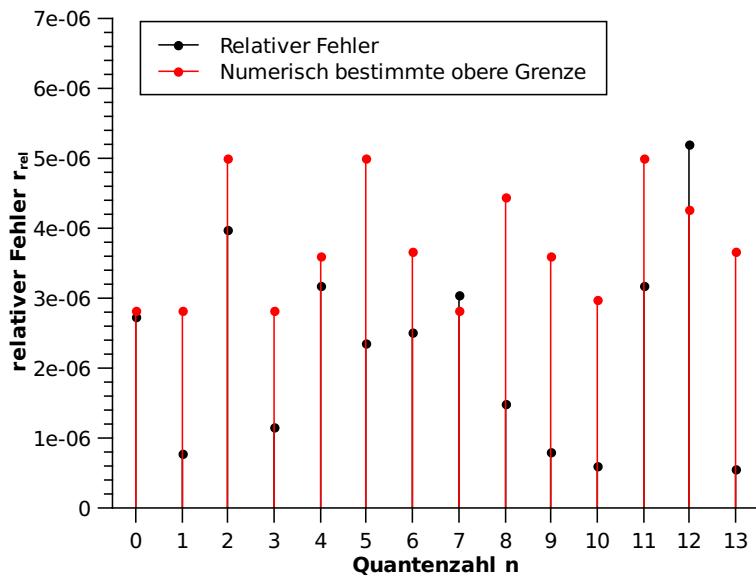
**Abbildung 3.17:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt  $h = 10^{-5}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von  $V_\infty = 10^{10}$  besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ).

Die numerisch bestimmten Fehlerintervalle liegen zwar in der selben Größenordnung wie die tatsächlichen Fehler, jedoch sind letztere etwas größer. Bei weiterer Erhöhung von  $V_\infty$  zeigt sich, dass die Unstetigkeit zu groß wird und das numerische Lösungsverfahren keine Lösungen mehr generieren kann. Daher muss die Schrittweite weiter sinken, um sich der höheren Unstetigkeit anzupassen.

Für  $h = 10^{-6}$  und  $V_\infty = 10^{11}$  sind die relativen Abweichungen in Abbildung 3.18 gezeigt.



**Abbildung 3.18:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt  $h = 10^{-6}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von  $V_\infty = 10^{11}$  besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ).



**Abbildung 3.19:** Relativer Fehler  $r_{rel}^{ana}$  und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers  $r_{rel}^{num}$  für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl  $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt  $h = 10^{-6}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von  $V_\infty = 10^{12}$  besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ).

Vergleicht man Abbildung 3.18 mit 3.17, so zeigt sich ein klarer Trend zu besser eingegrenzten Energieeigenwerten. Für  $V_\infty = 10^{12}$  bei gleicher Schrittweite ergeben sich die in Abbildung 3.19 dargestellten relativen Abweichungen.

Größtenteils liegen die exakten Energieeigenwerte bereits innerhalb des numerisch bestimmten Fehlerintervalls. Eine Annäherung des Potentials an den idealen Fall führt also zu immer besser übereinstimmenden Energieeigenwerten. Eine weitere Erhöhung von  $V_\infty$  bei kleiner werdenden  $h$  ist mit dem Programm in dieser Form nicht möglich. Die Berechnungen von sehr großen Zahlen mit sehr kleinen führt hier zu Rundungsfehlern, die eine weitere Annäherung verhindern.

### 3.3.3 Die Wellenfunktionen

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung ergibt, dass die Lösungen an den Stellen  $|x| = \frac{L}{2}$  stetig verschwinden müssen und für  $|x| > \frac{L}{2}$  Null bleiben. Für  $|x| < \frac{L}{2}$  entsprechen die Lösungen einfacher Oszillationen:

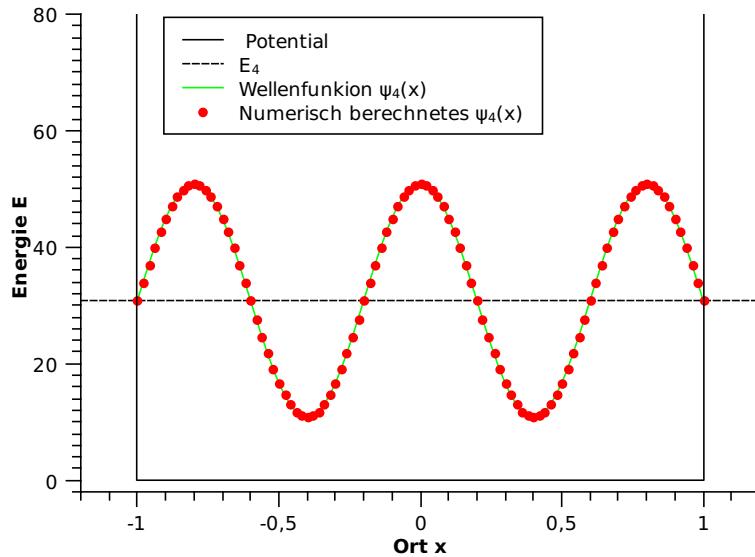
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & \text{für } n \text{ ungerade} \\ \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & \text{für } n \text{ gerade} \end{cases} \quad (3.41)$$

Der Grundzustand mit  $n = 0$  besitzt ebenso eine gerade Wellenfunktion, wodurch dieser zu geradem  $n$  gezählt wird. Exemplarisch gilt daher mit  $L = 2$  für die Wellenfunktionen zur Quantenzahl  $n = 4$  sowie  $n = 5$ :

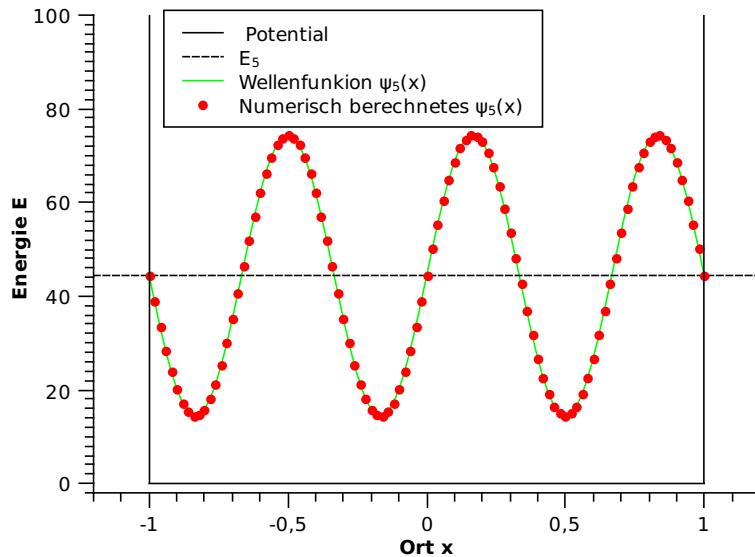
$$\Psi_4(x) = \cos(2\pi x) \quad (3.42)$$

$$\Psi_5(x) = \sin\left(\frac{5\pi}{2}x\right) \quad (3.43)$$

Diese sind in Abbildung 3.20 bzw. 3.21 mit der numerischen Lösung dargestellt.



**Abbildung 3.20:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Wellenfunktion zum Energieeigenwert  $E_4$  ( $h = 10^{-6}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ,  $V_\infty = 10^{12}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete Wellenfunktion auf das Energieniveau  $E_4$  angehoben wurde.



**Abbildung 3.21:** Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Wellenfunktion zum Energieeigenwert  $E_5$  ( $h = 10^{-6}$ ,  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ,  $V_\infty = 10^{12}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete Wellenfunktion auf das Energieniveau  $E_5$  angehoben wurde.

Wie gut zu erkennen ist, folgen die numerisch berechneten Wellenfunktionen dem qualitativen Verlauf der analytischen Lösungen. Auch hier wurde zu Darstellungs- zwecken die Zahl der Punkte der numerischen Lösung reduziert.

# 4 Diskussion und Ausblick

Der Vergleich der numerisch bestimmten Ergebnisse mit denen der analytischen Lösung zeigt im Gesamtbild eine sehr gute Übereinstimmung. Wie in den Fällen des harmonischen Oszillators und des Pöschl-Teller-Potentials beobachtet, verläuft die Konvergenz der Bisektion der Energieeigenwerte bis zu einer Größenordnung von  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$  problemlos. Es wurden in diesem Zusammenhang zugunsten der Übersichtlichkeit nur Quantenzahlen im Intervall  $n \in [0, 13]$  betrachtet. Es ergibt sich jedoch auch zu höheren Quantenzahlen dasselbe Bild.

Ab einer oberen Schranke von  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}$  liegt die Abweichung vom analytisch exakten Energieeigenwert in beiden Fällen bereits teilweise außerhalb des numerisch bestimmten Fehlerintervalls, woraus folgt, dass man die obere Schranke von  $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$  nicht unterschreiten sollte. Dies entspricht aber schon einer relativen Genauigkeit von  $10^{-6}\%$  und sollte für die meisten Fälle völlig ausreichen.

Gründe für diese Abweichungen liegen höchstwahrscheinlich in Rundungsfehlern beim Berechnen der Mitte des Bisektionsintervalls. Hier kann es passieren, dass die Dezimalstellen niedrigster Ordnung während der Berechnung abgeschnitten werden und damit, bei relativen Genauigkeiten dieser Größenordnung, der Energieeigenwert systematisch aus dem Bisektionsintervall wandert. Abhilfe könnte eine modifizierte Berechnung oder aber eine noch höherer Genauigkeit der Darstellung der Zahlen schaffen.

Der Spezialfall des unendlich hohen Potentialtopfs zeigt die Grenzen für numerisch darstellbare Unstetigkeiten auf. Die Abweichungen folgen aus der bereits angesprochenen endlichen Höhe der Potentialwände. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass bei Annäherung an den idealen Fall auch die Energieeigenwerte gegen das analytisch bestimmte Spektrum konvergieren.

Eine Konvergenz ist für noch höhere Potentialwände und gleichzeitig kleinerer Schrittweite nicht möglich, da es hier zur Verrechnung von Zahlen kommt, die in ihren maschinellen Darstellungen so weit auseinander liegen, dass die Rekursionsformel des Numerov-Algorithmus keine vernünftigen Wellenfunktionen mehr erzeugen kann. Die Berechnungen der Funktion  $F(x)$  aus Gleichung (2.28) liefern falsche Ergebnisse, woraus falsche Werte der Wellenfunktion folgen.

Um dieses Problem zu lösen, wäre es angebrachter die Wellenfunktion an den Orten der unendlich hohen Potentialwände direkt auf Null zu setzen, und von hier aus die Iteration zum Ursprung durchzuführen. Dies hätte zur Folge, dass man das Problem der Höhe der Potentialwände umgeht und dafür auf Randbedingungen am Ursprung projiziert. Hier müsste dafür gesorgt werden, dass die von links und von rechts einlaufenden Wellen am Ursprung stetig ineinander übergehen. Dies ist jedoch ein prinzipiell anderes Verfahren, und daher nicht im Kontext des Programms

umzusetzen.

Für die Wellenfunktionen wurde in allen Fällen ein qualitativ übereinstimmender Verlauf gezeigt. Auch hier könnten die Abweichungen zur analytischen Lösung betrachtet und diskutiert werden. Dies liegt jedoch nicht im Fokus dieser Arbeit.

Eine mögliche Weiterentwicklung des Programms würde die kugelsymmetrischen Potentiale mit einschließen. Dazu müsste die radiale Schrödinger-Gleichung gelöst werden, wofür spezielle Anfangsbedingungen am Ursprung gewählt werden. Die weitere prinzipielle Vorgehensweise wäre aber dieselbe, sodass dies als zusätzliche Funktion implementiert werden könnte. Da dies aber den Umfang dieser Arbeit gesprengt hätte, wurde bisher darauf verzichtet.

# 5 Anhang

## Quelltext

Der vollständig dokumentierte Quelltext ist als Projekt der Entwicklungsumgebung *NetBeans*<sup>1</sup> (Version 6.9) auf der mitgegebenen CD-ROM im Ordner *Quelltext* zu finden. Der Quelltext kann jedoch auch mit jedem beliebigen Texteditor geöffnet und bearbeitet werden, sowie mit einem C++-Kompiler plattformunabhängig kompiliert werden.

Im Ordner *MuParser* befindet der Quelltext der Bibliothek<sup>2</sup> inklusive der Lizenz.

Eine kompilierte 32-bit Version des Programms für Linux liegt im Ordner *numerov* bereit. Im gleichen Ordner befindet sich ein Beispiel der Parameter-Datei (*parameter.ini.example*) und eine kurze Anleitung.

---

<sup>1</sup><http://netbeans.org/>

<sup>2</sup><http://muparser.sourceforge.net/>



# Abbildungsverzeichnis

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |    |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1 | Schematische Darstellung des Verhalten der nicht normierten Lösung der Schrödinger-Gleichung bei Variation des Energieeigenwertes $E$ im Bereich $F(x) < 0$ . . . . .                                                                                                                                                                          | 14 |
| 2.2 | Schematisches Diagramm zwischen den einzelnen Klassen des implementierten Lösungsverfahrens. Die gestrichelten Linien deuten die Herkunft des zur Laufzeit erstellten Objekts der Klasse an. Die durchzogenen Linien zeigen die Zugriffswege zwischen den einzelnen Objekten. . . . .                                                          | 16 |
| 3.1 | Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmtem Spektrum des harmonischen Oszillators für Quantenzahlen $n \in [0, 25]$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet. . . . .                            | 21 |
| 3.2 | Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                              | 22 |
| 3.3 | Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                              | 22 |
| 3.4 | Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                              | 23 |
| 3.5 | Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                             | 24 |
| 3.6 | Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) als Betragsquadrat der Wellenfunktion zum Energieeigenwert $E_3$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau $E_3$ angehoben wurde. . . . . | 25 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.7 Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert $E_4$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau $E_4$ angehoben wurde. . . . .                                                                                                    | 26 |
| 3.8 Verlauf des modifizierten Pöschl-Teller-Potentials für $V_0 = -100$ und $\alpha = 1$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                       | 27 |
| 3.9 Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmtem Spektrum des Pöschl-Teller-Potentials für Quantenzahlen $n \in [0, 13]$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet. . . . .                                                  | 29 |
| 3.10 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                                                   | 29 |
| 3.11 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ( $h = 10^{-8}$ ). . . . .                                                   | 30 |
| 3.12 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-9}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                                                   | 31 |
| 3.13 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des Pöschl-Teller-Potentials zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die obere Grenze der relativen Genauigkeit beträgt $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}$ ( $h = 10^{-5}$ ). . . . .                                                  | 31 |
| 3.14 Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert $E_0$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau $E_0$ angehoben wurde. . . . .                                                                                                   | 33 |
| 3.15 Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter AWD zum Energieeigenwert $E_1$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-8}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete AWD auf das Energieniveau $E_1$ angehoben wurde. . . . .                                                                                                   | 34 |
| 3.16 Vergleich zwischen analytischem und numerisch bestimmten Spektrum des unendlichen hohen Potentialtopfs für Quantenzahlen $n \in [0, 25]$ ( $h = 10^{-5}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ , $V_\infty = 10^{10}$ ). Das Spektrum der analytischen Lösung ist ebenso diskret und hier nur zu Darstellungszwecken kontinuierlich abgebildet . . . . .                 | 35 |
| 3.17 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt $h = 10^{-5}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von $V_\infty = 10^{10}$ besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). . . . . | 36 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.18 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt $h = 10^{-6}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von $V_\infty = 10^{11}$ besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). . . . . | 37 |
| 3.19 Relativer Fehler $r_{rel}^{ana}$ und numerisch bestimmte obere Grenze des relativen Fehlers $r_{rel}^{num}$ für die Energieeigenwerte des unendlich hohen Potentialstopfs zur Quantenzahl $n \in [0, 13]$ . Die Schrittweite beträgt $h = 10^{-6}$ , wobei die Potentialwand eine Höhe von $V_\infty = 10^{12}$ besitzt ( $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ ). . . . . | 37 |
| 3.20 Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Wellenfunktion zum Energieeigenwert $E_4$ ( $h = 10^{-6}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ , $V_\infty = 10^{12}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete Wellenfunktion auf das Energieniveau $E_4$ angehoben wurde. . . . .                                                      | 39 |
| 3.21 Gegenüberstellung von analytisch und numerisch berechneter Wellenfunktion zum Energieeigenwert $E_5$ ( $h = 10^{-6}$ , $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-5}$ , $V_\infty = 10^{12}$ ). Die Normierung ist beliebig gewählt, wobei die abgebildete Wellenfunktion auf das Energieniveau $E_5$ angehoben wurde. . . . .                                                      | 39 |



# Literaturverzeichnis

- [Flü94] S. Flügge. *Practical quantum mechanics*, pages 94–100. Springer Verlag, 1994.
- [LL81a] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory*, pages 73–74. Butterworth Heinemann, 1981.
- [LL81b] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory*, pages 663–665. Butterworth Heinemann, 1981.
- [Nol09a] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik-Grundlagen*, pages 461,447. Springer Verlag, 2009.
- [Nol09b] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik-Grundlagen*, pages 248–261. Springer Verlag, 2009.
- [Rol03] H. Rollnik. *Quantentheorie 1: Grundlagen-Wellenmechanik-Axiomatik*, volume 1, pages 82–86. Springer Verlag, 2003.
- [Sch95] J. Schnakenberg. *Algorithmen in der Quantentheorie und statistischen Physik*, pages 1–5. Zimmermann-Neufang, 1995.
- [Wip06] A. Wipf. *Skript zu Vorlesung Quantenmechanik I*, pages 116–136. 2006.