

# Übungen zur Computerphysik

## SS 2020

T. Luu, A. Nogga, M. Petschlies, A. Wirzba

Hausaufgabe 4

Abgabe: 22.06.2020

---

Beachten Sie, dass **zwei zusätzliche Punkte** für die Kommentierung und den Stil des Codes vergeben werden.

### H.9: Grundzustand für $m, n$ -Potentiale

Wir betrachten Potentiale der Form

$$V(r) = V_0 \left( \left( \frac{R}{r} \right)^m - \frac{m}{n} \left( \frac{R}{r} \right)^n \right) \frac{n}{m-n} \quad (1)$$

mit  $m, n$  ganzzahlig und  $m > n$ . Ein bekanntes Beispiel ist das Lennard-Jones-Potential mit  $m = 12$  und  $n = 6$ , welches die Wechselwirkung neutraler Atome und Moleküle modelliert. Die Parametrisierung in Gl. (1) erfolgt mittels der Stelle des Potentialminimums  $R$  und der Tiefe des Potentialtopfes am Minimum  $V(R) = -V_0 < 0$ .

Das Ziel dieser Hausaufgabe ist die Bestimmung der quantenmechanischen Grundzustandsenergie (d.h. des ersten diskreten Energieniveaus über dem Potentialminimum) mit der in der VL vorgestellten Lanczos-Arnoldi-Methode im Impulsraum für das Lennard-Jones-Potential.

Ausgangspunkt ist wiederum die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \phi(\vec{x}) + V(\vec{x}) \phi(\vec{x}) = E \phi(\vec{x}), \quad (2)$$

wobei  $M$  ein Massenparameter ist.

Wir interessieren uns für Zustände (Wellenfunktionen  $\phi$ ) ohne Winkelabhängigkeit,  $\phi(\vec{x}) = \phi(r)$ , d.h. für Zustände zur Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 0$  ( $s$ -Welle). Das Fourier-transformierte Potential im Impulsraum

$$V(\vec{p}, \vec{p}') = \langle \vec{p} | V | \vec{p}' \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x}{(2\pi)^3} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\vec{x}} V(\vec{x}) \quad (3)$$

enthält zunächst Beiträge für alle  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . Mittels Partialwellenzerlegung der Exponentialfunktion

$$e^{i\vec{p}\vec{x}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(px) Y_{\ell}^m(\hat{p}) Y_{\ell}^m(\hat{x})^* \quad (4)$$

in sphärische Besselfunktionen  $j_{\ell}$  und Kugelflächenfunktionen<sup>1</sup>  $Y_{\ell}^m$  erhält man für unser kugelsymmetrisches Potential  $V(\vec{x}) = V(r)$  und mit  $j_0(x) = \sin(x)/x$  das Wechselwirkungspotential für  $\ell = 0$  als

---

<sup>1</sup> $\hat{a}$  bezeichnet den Richtungsvektor  $\vec{a}/|\vec{a}|$ .

$$V^{\ell=0}(p, p') = \frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty r^2 dr V(r) \frac{\sin(pr)}{pr} \frac{\sin(p'r)}{p'r}, \quad (5)$$

wobei  $p = |\vec{p}|$  und  $p' = |\vec{p}'|$ .

Für  $m, n$ -Potentiale müssen wir  $V^{\ell=0}(p, p')$  im Allgemeinen durch numerische Integration bestimmen. Bei derartigen Potentialfunktionen, die singulär im Ursprung sind, ist eine solche Integration herausfordernd (Warum? Wie verhält sich der Integrand in Gl. (5) in Abhängigkeit von  $p, p'$  für  $r \rightarrow 0$  ?)

## 2, 1-Potential

Wir beginnen mit dem 2, 1-Potential, also

$$V(r) = V_0 \left( \left( \frac{R}{r} \right)^2 - 2 \left( \frac{R}{r} \right) \right). \quad (6)$$

Für diesen Testfall können wir das  $s$ -Wellenpotential analytisch berechnen und die Stabilität und Genauigkeit der numerischen Berechnung testen.

1. (1 P) Zeigen Sie, dass durch Variablenwechsel  $\vec{y} = \vec{x}/R$  die Schrödinger-Gleichung in die Form

$$0 = \left( -\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + v(y) - \epsilon \right) \psi(\vec{y}) \quad (7)$$

$$v(y) = v_0 \left( \frac{1}{y^2} - \frac{2}{y} \right)$$

gebracht werden kann. Wir nehmen also die Längen in Einheiten von  $R$  und Impulse in Einheiten von  $\hbar/R$ . In welcher Einheit wird die Energie genommen ?

2. (2 P) Der Übergang zum Impulsraum führt auf die aus der VL bekannte, äquivalente Darstellung als Integralgleichung:

$$\epsilon \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{2} p^2 \tilde{\psi}(p) + \int_0^\infty dp' p'^2 v^{\ell=0}(p, p') \tilde{\psi}(p') \quad (8)$$

$$v^{\ell=0}(p, p') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty y^2 dy v(y) \frac{\sin(py)}{py} \frac{\sin(p'y)}{p'y}. \quad (9)$$

Um die Konvergenz des Integrals für  $y \rightarrow \infty$  zu verbessern und die Wohldefiniertheit von  $v^{\ell=0}(p, p')$  für alle  $p, p' \geq 0$  für diesen Testfall zu erreichen, fügen wir einen exponentiellen Abklingfaktor hinzu, d.h. wir betrachten das modifizierte Potential

$$v_\mu(y) = v_0 \left( \frac{1}{y^2} - \frac{2}{y} \right) e^{-\mu y}, \quad \mu > 0. \quad (10)$$

Bestimmen Sie analytisch das entsprechende Potential  $v_{\mu}^{\ell=0}(p, p')$ .

Hinweis: (1) Für  $\mathcal{I}(\mu) = \int dy e^{-\mu y} \sin(ay) \sin(by)/y$ ,  $\mu > 0$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$ , betrachten Sie  $\partial \mathcal{I}(\mu)/\partial \mu$  und das Verhalten von  $\mathcal{I}$  für  $\mu \rightarrow \infty$ .

(2)  $\int dy \log(f(y)) = y \log(f(y)) - \int dy y f'(y)/f(y)$ .

3. (3 P) Implementieren Sie die Berechnung des Potentials  $v_{\mu}^{\ell=0}$  durch numerische Integration mit dem Gauss-Legendre-Verfahren. Testen Sie Ihr numerisch bestimmtes  $v_{\mu}^{\ell=0}$  gegen die analytische Form.  
Diskretisieren Sie im Impulsraum für  $0 \leq p \leq p_{\max} = 200$  mit  $n_p = 400$  Stützstellen. Bestimmen Sie die maximale relative Abweichung in diesem Bereich für  $n_y = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$  Stützstellen in der  $y$ -Integration.  
Parameter:  $\mu = 1$ ,  $v_0 = 400$ ,  $R = 1$ , Integrationsgrenzen  $0 \leq y \leq 10$ .
4. (4 P) Verwenden Sie das Lanczos-Arnoldi-Verfahren zur Bestimmung der Grundzustandsenergie mit numerischem und analytischem  $v_{\mu}^{\ell=0}$ . Prüfen Sie die Stabilität des gefundenen Energiewertes und die Übereinstimmung für numerisches vs. analytisches  $v_{\mu}^{\ell=0}$  in Abhängigkeit von der Anzahl der  $y$ -Stützstellen  $n_y$ ,  $p_{\max}$  und  $n_p$ . Geben Sie das Ergebnis mit 4 Ziffern Genauigkeit an.
5. (2 P) Entwickeln Sie das Potential um die Gleichgewichtslage bis zur Ordnung  $y^2$  und vergleichen Sie die in der vorigen Teilaufgabe bestimmte Grundzustandsenergie mit dem 1. Energieniveau des so angenäherten Oszillatorpotentials. (Beachten Sie, dass sich durch die Wahl  $\mu = 1$  das Minimum, also die Gleichgewichtslage verschiebt. Berücksichtigen Sie das bei dieser harmonischen Näherung.)

## 12,6-Potential

Betrachten Sie nun das Lennard-Jones-Potential

$$V(r) = V_0 \left( \left( \frac{R}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R}{r} \right)^6 \right). \quad (11)$$

In diesem Fall ist auf Grund der stärkeren Singularität keine analytische Integration mehr möglich und wir müssen uns auf die Numerik verlassen. Die numerische Integration ist auf Grund der stärkeren Singularität allerdings ebenfalls erschwert.

6. (1 P) Implementieren Sie die numerische Berechnung des zu  $V(r)$  in Gl. (11) gehörigen  $v_{\mu}^{\ell=0}(p, p')$  mit dem Gauss-Legendre-Verfahren.  
Aufgrund der Singularität des Potentials im Ursprung benötigen wir hier auch eine untere Integrationsgrenze  $y_{\min} > 0$ . Wenn  $y_{\min}$  klein genug gewählt wird, dann wird die Grundzustandsenergie nur noch schwach von  $y_{\min}$  abhängen, sodass wir die Energie mit dem Lanczos-Arnoldi-Verfahren näherungsweise berechnen können.
7. (4 P) Bestimmen Sie Grundzustandsenergie mit dem Lanczos-Arnoldi-Verfahren für  $v_0 = 400$  und  $R = 1$ .  
Als Richtwert für die Integrationen:  $n_y = 20000$ ,  $n_p = 2000$ ,  $p_{\max} = 400$ .  
Integrationsgrenzen  $y_{\min} = 0.4 \leq y \leq 10 = y_{\max}$ .

Untersuchen Sie die Genauigkeit Ihres Resultates durch Variation der Parameter  $0.4 \leq y_{\min} \leq 0.8$ ,  $200 \leq p_{\max} \leq 1000$  und  $200 \leq n_p \leq 2000$  und  $10^3 \leq n_y \leq 4 \cdot 10^4$

8. (1 P) Vergleichen Sie wiederum mit der harmonischen Näherung für die Grundzustandsenergie.