441 Computerphysik - Hausaufgabe 3

Lars Döpper

14. Juni 2020

H.9: Grundzustand für (m,n)-Potentiale

In dieser Hausaufgabe beschäftigen wir uns mit allgemeinen Potentialen der Form:

$$V_{m,n}(r) = V_0 \left(\left(\frac{R}{r} \right)^m - \frac{m}{n} \left(\frac{R}{r} \right)^n \right) \frac{n}{m-n} \tag{1}$$

Mit den Einschränkungen $V_0 > 0$ und $m > n$. Ziel dieser Hausaufgabe ist die Bestimmung der Grundzustandsenergie des Lennard-Jones-Potentials mit $m = 12$ & $n = 6$. Dazu gehen wir wieder von der zeitunabhängigen Schrödingergleichung aus:

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

Und setzen in diese dann das (m,n)-Potential ein und suchen nach dem ersten Eigenwert dieses Problems. Wir interessieren uns allerdings nur für die sog. s-Wellen, also für die Wellen mit Drehimpulsquantenzahl $l = 0$. Somit ist das Potential nicht mehr Richtungsabhängig und wir können das Potential im Impulsraum schreiben als:

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

Für allgemeine (m,n)-Potentiale müssen wir dieses Integral zumeist numerisch lösen. In dieser hausaufgabe verwenden wir dafür die Integrationsmethode nach Gauß und Legendre.

Das (2,1)-Potential

Um unsere Methoden zu entwickeln und auf ihre Richtigkeit zu prüfen, untersuchen wir zunächst das (2,1)-Potential. Dieses lautet dann:

$$V(r) = V_0 \left(\left(\frac{R}{r} \right)^2 - 2 \left(\frac{R}{r} \right) \right) \tag{4}$$