Prof. Jan Kierfeld
Theoretische Physik Ib
Raum P1-O2-312
Tel. 3545
email: Jan.Kierfeld@tu-dortmund.de

24. Mai 2013
Besprechung am 4./5./7. Juni

Computational Physics
Übung 6

Schrödinger-, Poisson-Gleichung

Achtung: Sie können sich eine der beiden Aufgaben aussuchen!

Aufgabe 1: Zeitabhängige Schrödingergleichung

Wir simulieren die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens in einer Dimension mit der Wellenfunktion $\psi(x,t)$ im harmonischen Oszillatorpotential. Dazu integrieren wir numerisch die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = \hat{H}\psi. \tag{1}$$

Der Anfangszustand soll ein normiertes Gaußpaket sein (siehe unten Gleichung (5)).

a) Zunächst machen wir die Schrödingergleichung (1) einheitenlos, indem wir Zeit- und Ortskoordinaten umskalieren. Wir messen Zeit in Einheiten von $2/\omega$ und reskalieren $\tau \equiv \omega t/2$. Mit welchem Faktor α muss die Ortskoordinate reskaliert werden, $\xi \equiv \alpha x$, um die Schrödingergleichung (1) in die Form

$$i\partial_\tau\psi = -\partial_\xi^2\psi + \xi^2\psi = \hat{\tilde{H}}\psi \tag{2}$$

zu bringen? Mit welchem Faktor β haben wir dann den Hamiltonoperator $\hat{\tilde{H}} = \beta\hat{H}$ reskaliert?

b) Wir verwenden den Crank-Nicholson Algorithmus und lösen die einheitenlose Schrödingergleichung (2) auf einem Gitter $\xi_n = n\Delta\xi$.

Der diskretisierte Hamiltonoperator ist dann durch die Matrix

$$H_{nm} = -\frac{1}{(\Delta\xi)^2}\left(\delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} - 2\delta_{nm}\right) + (\Delta\xi)^2 n^2\delta_{nm} \tag{3}$$

gegeben. Der diskretisierte Zeitentwicklungsoperator für einen Zeitschritt der Länge Δt nach Crank und Nicholson lautet

$$\mathbf{S}_H = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{2}\mathbf{H}\Delta t\right)^{-1} \left(\mathbb{1} - \frac{i}{2}\mathbf{H}\Delta t\right) \tag{4}$$

Berechnen Sie diese Matrix für $\Delta t = 0.05$ für ein System der Größe $\xi \in [-10, 10]$, das mit $\Delta\xi = 0.1$ diskretisiert wird. Welche Dimension haben dann die Matrizen $\mathbf{H}$ und $\mathbf{S}_H$? Zur Berechnung der Inversen in (4) können Sie einen Algorithmus Ihrer Wahl (z.B. Gauß-Elimination, LU-Zerlegung, Jacobi-Gauß-Seidel-Iteration) selbst programmieren oder ein entsprechendes fertiges Unterprogramm, z.B. aus LAPACK oder NumRec verwenden.

c) Der Anfangszustand soll ein normiertes Gaußpaket sein mit $\langle\xi\rangle = \int d\xi\xi|\psi(\xi,t)|^2 = \xi_0$ und $\langle\Delta\xi^2\rangle = \sigma$:

$$\psi(\xi, 0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/4\sigma}. \tag{5}$$

Wie lautet der diskretisierte Anfangszustandsvektor $\psi_n(0)$, der diesem Anfangszustand entspricht? Welche Dimension hat er? Normieren Sie den diskretisierten Anfangszustand $\psi_n(0)$ numerisch in ihrem Programm.
Als Lösung Plot von $|\psi_n(0)|^2$ (als Funktion von n) einschicken.

d) Berechnen Sie für einen solchen Anfangszustand mit $\xi_0 = \sigma = 1$ den Zustand $\psi_n(t)$ nach einer Zeit $t = 10$ durch fortgesetzte Matrixmultiplikation mit dem in b) berechneten Crank-Nicholson Zeitentwicklungsoperator $\mathbf{S}_H$. Prüfen Sie, ob der Zustand $\psi_n(t)$ während der Zeitentwicklung normiert bleibt.
Als Lösung Plots von $|\psi_n(t = 10)|^2$ (als Funktion von n) einschicken. Plot der Normierung $\sum_n(\Delta\xi)|\psi_n(t)|^2$ als Funktion der Zeit einschicken.

e) Versuchen Sie, den Zeitverlauf der Wellenfunktion zu visualisieren/animieren, indem Sie mindestens 4 Plots der Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb einer Schwingungsperiode 2π anfertigen.
Eben diese 4 Plots (oder ein Movie oder eine andere äquivalente Animation) einschicken.

f) Berechnen Sie den Mittelwert $\langle\xi\rangle(t) = \sum_n(\Delta\xi)\xi_n|\psi_n(t)|^2$ und entsprechend die Schwankung $\langle\xi^2\rangle(t) - \langle\xi\rangle^2(t)$ während der Bewegung $0 < t < 10$. Erstellen Sie Plots vom zeitlichen Verlauf dieser Größen. Berechnen Sie außerdem Mittelwert und Schwankung des zu $\hat{\xi}$ gehörigen "Impulsoperators" $\hat{p}_\xi \equiv -i\partial_\xi$ und plotten Sie auch deren zeitlichen Verlauf. Diskutieren Sie die Ergebnisse vor dem Hintergrund der klassischen Bewegung im Oszillatorpotential und der Heisenbergschen Unschärferelation.
Die im Aufgabentext erwähnten Plots einschicken.

g) freiwillige Zusatzaufgaben:
a)Verwenden Sie ein einfaches explizites Schema statt des Cranck-Nicholson-Schemas (4) und vergleichen Sie die Ergebnisse, besonders bezgl. Normierung.

b) Fügen Sie noch eine kleine Anharmonizität

$$V_{nm} = +\epsilon(\Delta\xi)^4 n^4 \delta_{nm} \tag{6}$$

zum Hamiltonian **H** hinzu und vergleichen Sie das Verhalten des Wellenpaketes.

Aufgabe 2: Poisson-Gleichung

Lösen Sie die 2D Poisson-Gleichung

$$\partial_x^2 \phi + \partial_y^2 \phi = -\rho(x, y) \tag{7}$$

(also $\epsilon_0 = 1$) mit Hilfe der Jacobi- oder der Gauß-Seidel-Iteration für folgendes System:

- Ein Quadrat $Q = [0, 1] \times [0, 1]$
- Dirichlet-Randbedingungen mit vorgegebenem Potential ϕ auf den Quadraträndern.
- Als Quellen positionieren Sie im Inneren diskrete Ladungen q_i an Orten $\mathbf{r}_i$, also $\rho(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$.

a) Diskretisieren Sie das System mit $\Delta = 0.05$ und implementieren Sie die Jacobi- und/oder Gauß-Seidel-Iteration. Bei jeder Iteration sollte der Algorithmus einmal jeden Gitterplatz im Inneren updaten (ohne die Ränder zu verändern). Wählen Sie als Anfangsbedingung $\phi = 0$ und testen Sie den Algorithmus für $\rho = 0$ (keine Quellen) für Randbedingungen $\phi = \text{const} = 0$. Schreiben Sie eine Ausgaberoutine für $\phi(\mathbf{r})$ und das elektrische Feld $\mathbf{E} = -\nabla\phi$.

b) Lösen Sie nun die Poissongleichung für $\rho = 0$ im Inneren und mit Randbedingungen $\phi = 0$ auf den 3 Rändern $x = 0$, $x = 1$ und $y = 0$, aber $\phi(x, 1) = 1$ auf dem Rand $y = 1$. Leiten Sie auch die analytische Lösung für $\phi(x, y)$ her (Fourierzerlegung, siehe Vorlesung) und vergleichen Sie das Resultat.
Plot vom Ergebnis für $\phi(x, y)$ einschicken.

c) Wählen Sie wieder $\phi = \text{const} = 0$ auf allen Rändern und setzen nun eine Ladung $q_1 = +1$ ins Innere. Berechnen Sie $\phi(\mathbf{r})$ im Inneren durch Iteration, bis zu einer Genauigkeit 10^{-5}. Plotten Sie die Potentialverteilung $\phi(\mathbf{r})$ und den Betrag der Feldstärke $|\mathbf{E}|(\mathbf{r})$.
Plot von $\phi(x, y)$ und $|\mathbf{E}|(x, y)$ einschicken.

d) Überzeugen Sie sich, dass das elektrische Feld am Rand keine Tangentialkomponente besitzt (warum?). Berechnen Sie numerisch die auf dem Rand influenzierte Ladungsdichte σ über die Normalkomponente des Feldes $\sigma = -\mathbf{n} \cdot \nabla\phi = E_n$. Berechnen Sie numerisch das Linienintegral $\int_{\partial Q} dl \sigma$, also das 2D-Analogon zur Oberflächenladung $\int_{\partial Q} df \sigma$ in 3D. Wie lautet das theoretische Ergebnis für diese influenzierte Oberflächenladung? (Sie können diese Frage auch in 3 Dimensionen beantworten)
Plot des Winkels zwischen E-Feld und Rand für einen der 4 Ränder einschicken. Ergebnis für das Linienintegral und theoretisch erwarteten Wert einschicken.

e) Wählen Sie sich eine andere neutrale Ladungskonfiguration mit mindestens 2 Ladungen ($\sum_i q_i = 0$) und Randbedingungen $\phi = \text{const} = 0$ auf allen Rändern. Führen Sie wieder die Aufgabenstellungen aus **c)** und **d)** durch.