Prof. Joachim Stolze
joachim.stolze@tu-dortmund.de

Sommersemester 2017
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 6

Ausgabe: 02.06.2017 Abgabe: 09.06.2017

Verständnisfragen

- Wie würden Sie versuchen partielle Differentialgleichungen mit Anfangsbedingungen zu lösen? Welche Arten von Verfahren kennen Sie und wo sehen Sie Schwierigkeiten?
- Macht es für Sie einen Unterschied, ob Sie die Poisson-Gleichung in 1D oder 2D lösen wollen?
- Welche Arten von Randwertproblemen sind Ihnen bekannt?

Aufgabe 1. Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (10 P.)

Eine der bekanntesten partiellen Differentialgleichungen mit Anfangswertproblem in der Physik ist die Schrödingergleichung. Im Folgenden soll die Bewegung eines Wellenpakets mit der Wellenfunktion $\psi(x,t)$ durch Potentialbarrieren verschiedener Höhen in einer Dimension simuliert werden. Eine Besonderheit hierbei ist, dass mit komplexen Zahlen gearbeitet werden muss.

Dazu wird die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V_0\Theta\left(\frac{B}{2} - |x|\right)\psi = \hat{H}\psi \tag{1}$$

(mit der Stufenfunktion $\Theta()$) numerisch integriert. Der Anfangzustand soll ein normiertes Gauß-Paket sein (siehe (7)).

a) Zunächst soll die Schrödinger-Gleichung (1) einheitenlos gemacht werden, indem die Orts- und Zeitkoordinate umskaliert werden. Die Zeit soll in Einheiten von $2/\omega$ gemessen, so dass für die einheitenlose Zeit τ gilt:

$$\tau = \frac{\omega t}{2}\,. \tag{2}$$

Mit welchem Faktor α muss die Ortskoordinate reskaliert werden ($\xi = \alpha x$, $b = \alpha B$), um die Schrödinger-Gleichung (1) in die folgende Form zu bringen:

$$\mathrm{i}\partial_\tau\psi = -\partial_\xi^2\psi + \tilde{V}_0\Theta\left(\frac{b}{2} - |\xi|\right)\psi = \hat{\tilde{H}}\psi? \tag{3}$$

Mit welchem Faktor β wurde dann also der Hamilton-Operator skaliert:

$$\hat{\tilde{H}} = \beta\hat{H}\,? \tag{4}$$

Abgabe: Herleitung der Faktoren α und β

b) Im Folgenden wird der Crank-Nicolson-Algorithmus verwendet, um die einheitenlose Schrödinger-Gleichung (3) auf einem Gitter $\xi_j = j\Delta\xi$ zu lösen. Der diskretisierte Hamilton-Operator ist dann durch eine Matrix H mit den Einträgen gegeben:

$$H_{nm} = -\frac{1}{\Delta\xi^2}\left(\delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} - 2\delta_{nm}\right) + \tilde{V}_0 \Theta\left(\frac{b}{2} - |x|\right)\delta_{n,m}. \tag{5}$$

Der diskretisierte Zeitentwicklungsoperator für einen Zeitschritt der Länge $\Delta\tau$ nach Crank und Nicolson lautet:

$$S_H = \left(\mathbb{1} + \frac{\mathrm{i}}{2}H\Delta\tau\right)^{-1}\left(\mathbb{1} - \frac{\mathrm{i}}{2}H\Delta\tau\right). \tag{6}$$

Berechnen Sie diese Matrix mit $\Delta\tau = 0.01$ für ein System der Größe $\xi \in [-10, 10]$, das mit $\Delta\xi = 0.1$ diskretisiert wird.

Hinweis: Verwenden Sie zur Berechnung der Inversen in (6) eine bereits implementierte Funktion, z.B. die `inverse`-Methode, wenn Sie `Eigen` verwenden[1].
Auch zur Implementierung von komplexen Zahlen bieten sich die fertigen Klassen aus `Eigen` an.

Abgabe: Welche Dimension haben die Matrizen H und S_H?

c) Der Anfangszustand soll ein normiertes Gauß-Paket sein:

$$\psi(\xi, \tau = 0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{4\sigma}\right) e^{i\xi k_0}. \tag{7}$$

Wie sieht der diskretisierte Anfangszustandsvektor mit den Komponenten $\psi(\xi_j, \tau = 0)$ aus und welche Dimension hat er? Welche Bedeutung haben die Konstanten ξ_0, σ und k_0?
Verwenden Sie $\xi_0 = -5$, $\sigma = 1$ und $k_0 = 5.5$.

Abgabe: Antworten auf Fragen und Plot von $\left|\psi(\xi_j, 0)\right|^2$ als Funktion von j

d) Berechnen Sie für den Anfangszustand (7) den Zustand zum Zeitpunkt $\tau = 1$ durch fortgesetzte Matrixmultiplikation mit dem Zeitentwicklungsoperator (6). Verwenden Sie hierzu Potentialbarrieren der Höhe $\tilde{V}_0 \in \{0, 10, 30, 50\}$ und der Breite $b = 1$.

Was beobachten Sie?

Abgabe: Plots von $\left|\psi(\xi_j, \tau = 1)\right|^2$ als Funktion mit Erklärung

e) Berechnen Sie für die drei Fälle aus dem vorherigen Aufgabenteil den Transmissionskoeffizienten, indem Sie die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass sich ein Teilchen bei $\xi > 0$ befindet:

$$\sum_{j(\xi_j > 0)} \Delta\xi \left|\psi(\xi_j, \tau)\right|^2. \tag{8}$$

Abgabe: Plot des Transmissionskoeffizienten als Funktion der Zeit.

[1] siehe `https://eigen.tuxfamily.org/dox/group__TutorialLinearAlgebra.html#title3`

Aufgabe 2. Poisson-Gleichung (10 P.)

Lösen Sie die zweidimensionale Poisson-Gleichung ($\epsilon_0 = 1$)

$$\left(\partial_x^2 + \partial_y^2\right) \phi(x,y) = -\rho(x,y) \tag{9}$$

mit Hilfe der Gauß-Seidel-Iteration für folgendes System:

- ein Quadrat $Q = [0,1]^2$,
- Dirichlet-Randbedingungen mit vorgegebenem Potential ϕ auf den Rändern von Q,
- diskrete Ladungen q_i im Innern an den Orten $\boldsymbol{r}_i$ als Quellen, so dass für die Ladungsdichte gilt:

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_i q_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\,. \tag{10}$$

a) Diskretisieren Sie das System mit $\Delta = 0.05$ und implementieren Sie die Gauß-Seidel-Iteration. Bei jeder Iteration soll der Algorithmus einmal jeden Gitterplatz im Inneren aktualisieren (ohne die Ränder zu verändern). Schreiben Sie außerdem eine Ausgaberoutine für $\phi(\boldsymbol{r})$ und das elektrische Feld $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\nabla\phi(\boldsymbol{r})$. Wählen Sie als Anfangsbedingungen $\phi(x,y) = 1$ im Inneren und testen Sie den Algorithmus für $\rho = 0$ (keine Quellen) für die Dirichlet-Randbedingung $\phi = \text{const} = 0$.

   Abgabe: Plots von $\phi(x,y)$ und $|\boldsymbol{E}|(x,y)$

b) Lösen Sie die Poisson-Gleichung für $\rho(x,y) = 0$ im Inneren und mit den Randbedingungen $\phi = 0$ auf den drei Rändern $x = 0$, $x = 1$ und $y = 0$, aber $\phi(x,1) = 1$ auf dem Rand $y = 1$. Vergleichen Sie das analytische Ergebnis mit Ihrem numerischen Resultat. Die analytische Lösung für $\phi(x,y)$ lautet

$$\Phi(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(1-\cos(n\pi))}{n\pi\sinh(n\pi)} \sin(n\pi x)\sinh(n\pi y). \tag{11}$$

   Für engagierte Studenten: Leiten Sie die analytische Lösung über eine Fourier-Zerlegung oder einen Separationsansatz her.

   Abgabe: Plots der numerischen und analytischen Ergebnisse für $\phi(x,y)$ (min. 10 nicht verschwindende Terme der Reihe), Plot der numerischen Ergebnisse für $|\boldsymbol{E}|(x,y)$

c) Wählen Sie wieder $\phi = \text{const} = 0$ auf allen Rändern und setzen Sie nun eine Ladung $q_1 = +1$ in die Mitte von Q. Berechnen Sie $\phi(\boldsymbol{r})$ im Inneren durch Iteration bis zu einer Genauigkeit von 10^{-5}.

   Abgabe: Plots von $\phi(x,y)$ und $|\boldsymbol{E}|(x,y)$