

Aufgabe 1: Zeitabhängige Schrödingergleichung

Wir betrachten die Schrödingergleichung für eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$, welches sich durch ein Potential mit Barrieren verschiedener Höhe bewegt:

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

a)

Die Schrödingergleichung soll nun einheitenlos gemacht werden. Hierzu wird die Zeit in Einheiten von $2/\omega$ gemessen werden, sodass für die einheitenlose Zeit τ gilt:

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

Zusätzlich soll die Ortskoordinate reskaliert werden um einen Faktor α :

$$\begin{aligned}\xi &= \alpha x \\ b &= \alpha B\end{aligned}$$

Durch die Reskalierungen erhält auch der Hamiltonian eine neue Form:

$$\tilde{\hat{H}} = \beta \hat{H}.$$

Aus der Reskalierung von τ folgt

$$\partial_t = \frac{\omega}{2}\partial_\tau.$$

Die Skalierung der Ortskoordinate liefert

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial(\alpha\xi)} \left(\frac{\partial}{\partial(\alpha\xi)} \right) \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\end{aligned}$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\omega}{2}\partial_\tau\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\alpha^2}\partial_\xi^2\psi + V_0\theta\left(\frac{\alpha b}{2} - |\alpha\xi|\right)\psi = \hat{H}\psi \\ \Leftrightarrow i\partial_\tau\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{\hbar\omega}\frac{1}{\alpha^2}\partial_\xi^2\psi + \frac{2}{\hbar\omega}V_0\theta\left(\frac{b}{2} - |\xi|\right)\psi = \frac{2}{\hbar\omega}\hat{H}\psi \\ \Leftrightarrow i\partial_\tau\psi &= -\partial_\xi^2\psi + \tilde{V}_0\theta\left(\frac{b}{2} - |\xi|\right)\psi = \tilde{\hat{H}}\psi\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}\alpha &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \beta &= \frac{2}{\hbar\omega} \\ \tilde{\hat{H}} &= \beta \hat{H} \\ \tilde{V}_0 &= \beta V_0\end{aligned}$$

b)

Es gilt die Gleichung

$$\xi_j = j\Delta\xi$$

Es wird ein System der Größe $\xi \in [-10, 10]$ betrachtet, die Diskretisierung ist $\Delta\xi = 0.1$. Um mit der Diskretisierung das gesamte System abzudecken, muss der Hamilton-Operator die Dimension $20/\Delta\xi + 1 = 201$ besitzen. S_H besitzt die gleiche Dimension wie H .

c)

Der Anfangszustand ist ein normiertes Gauß-Paket:

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

Der Anfangszustand besitzt, genau wie der Hamilton-Operator, die Dimension 201. ξ_0 ist der Erwartungswert, σ die Standardabweichung und k_0 die Startwellenzahl. k_0 legt im Wesentlichen die Ausbreitungsrichtung und -Geschwindigkeit der Wellenfunktion fest.

Je nachdem, wie der Laufindex j gewählt wird (von 0 bis 201 oder auch von -100 bis 100) unterscheiden sich die Darstellungen ein wenig. Läuft der Index j von -100 bis 100, dann ist die Diskretisierung

$$\psi(\xi_j, \tau = 0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(j\Delta\xi - \xi_0)^2}{4\sigma}\right) e^{ij\Delta\xi k_0}$$

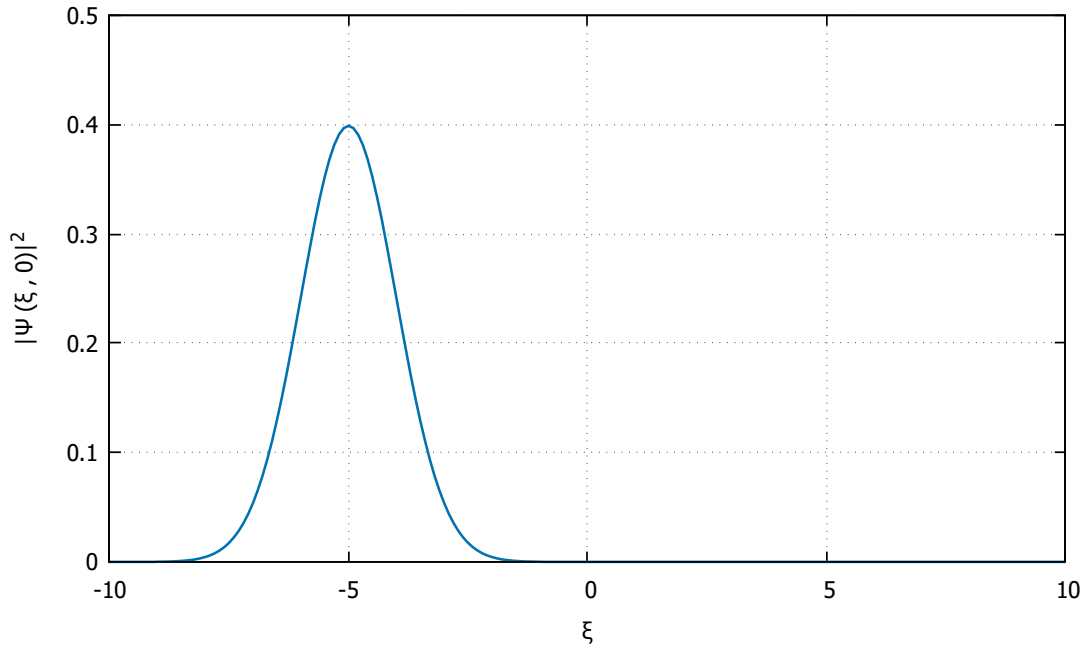


Abbildung 1: Darstellung des Anfangszustands $|\psi(\xi, 0)|^2$ mit den verwendeten Parametern $\xi_0 = -5$, $\sigma = 1$ und $k_0 = 5.5$.

d)

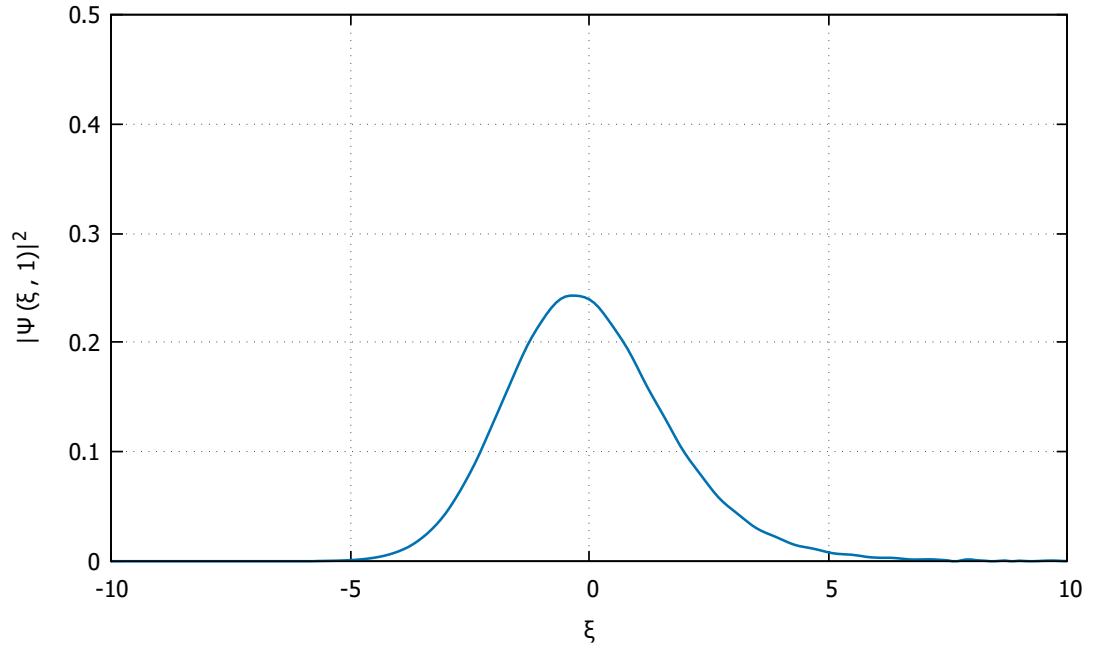


Abbildung 2: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt $\tau = 1$ bei einer Potentialstufe der Höhe $\tilde{V}_0 = 0$. Ohne Potentialstufe breitet sich das Wellenpaket ungehindert nach 'rechts' hin aus. Es kommt zu keiner Überlagerung von hin- und rückläufiger Welle.

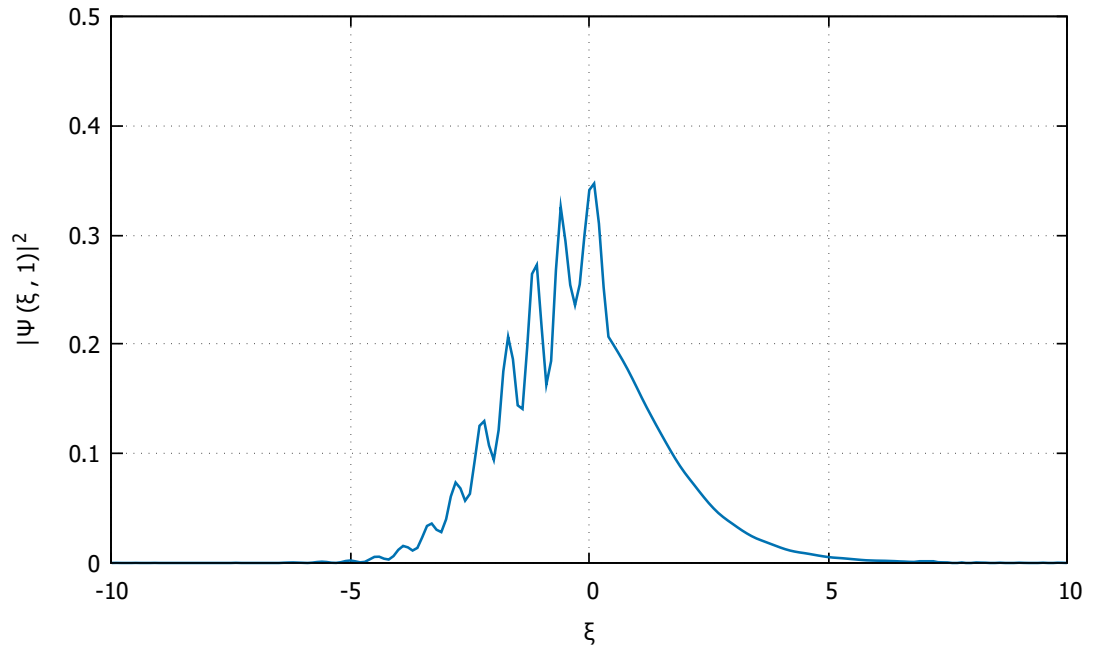


Abbildung 3: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt $\tau = 1$ bei einer Potentialstufe der Höhe $\tilde{V}_0 = 10$. Das Wellenpaket wird teilweise an der Potentialbarriere reflektiert. Das Wellenpaket besitzt daher eine sichtbare Wahrscheinlichkeitsdichte vor und hinter der Barriere.

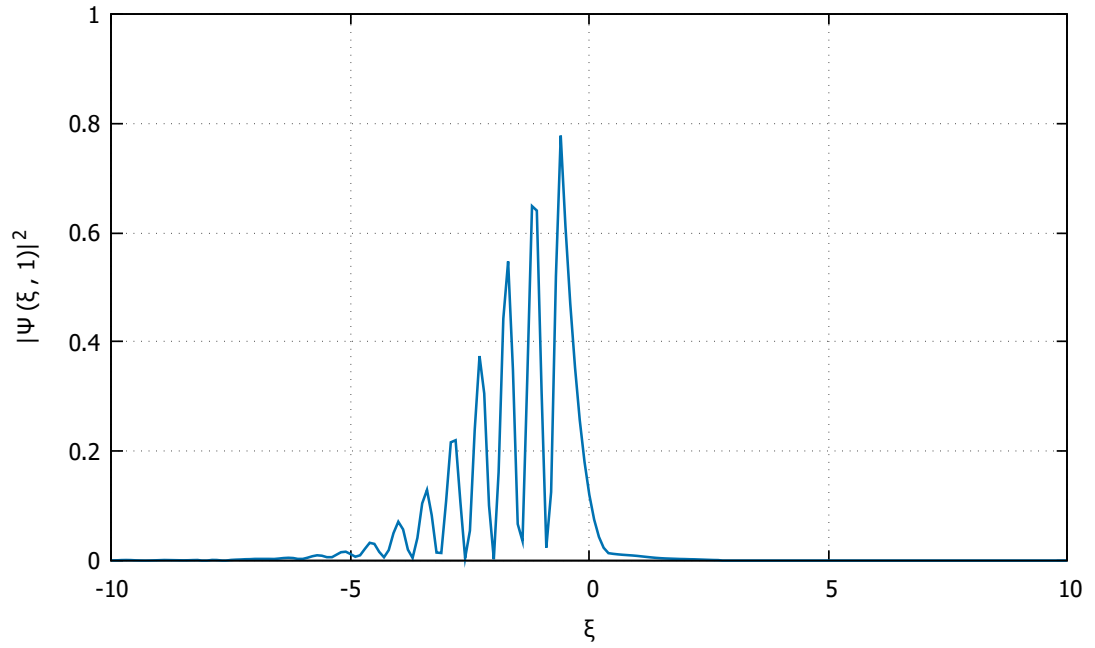


Abbildung 4: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt $\tau = 1$ bei einer Potentialstufe der Höhe $\tilde{V}_0 = 30$. Der transmittierte Anteil ist nun aufgrund der höheren Potentialbarriere deutlich geringer. Vor der Potentialbarriere kommt es zu Interferenzeffekten zwischen hin- und rückläufiger Welle.

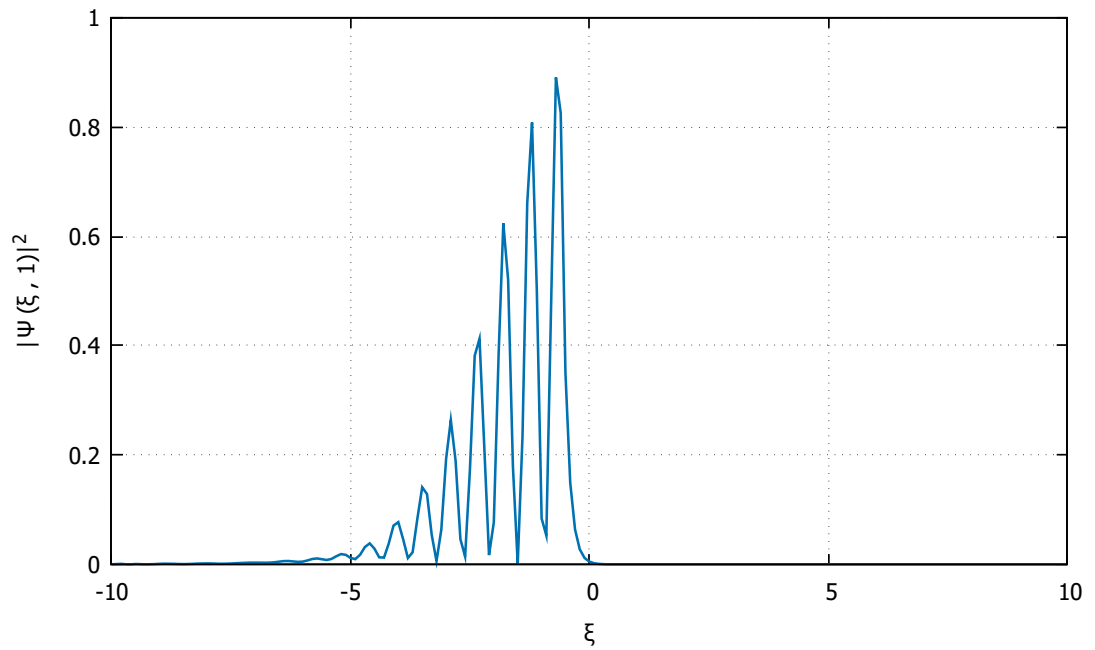


Abbildung 5: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt $\tau = 1$ bei einer Potentialstufe der Höhe $\tilde{V}_0 = 50$. Es zeigt sich ein ähnliches Bild wie bei der Potentialbarriere der Höhe $\tilde{V}_0 = 30$, allerdings ist der transmittierte Anteil deutlich geringer (vgl. hierzu auch den folgenden Aufgabenteil).

e)

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Teilchen bei $\xi > 0$ befindet, ist gegeben durch

$$T(\tau) = \sum_{\substack{j \\ \xi_j > 0}} \Delta \xi |\psi(\xi_j, \tau)|^2.$$

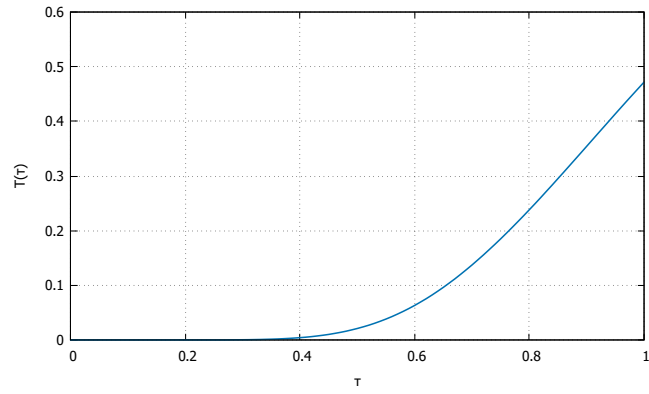


Abbildung 6: Darstellung von $T(\tau)$ für $V_0 = 10$ im Zeitraum $\tau \in [0, 1]$.

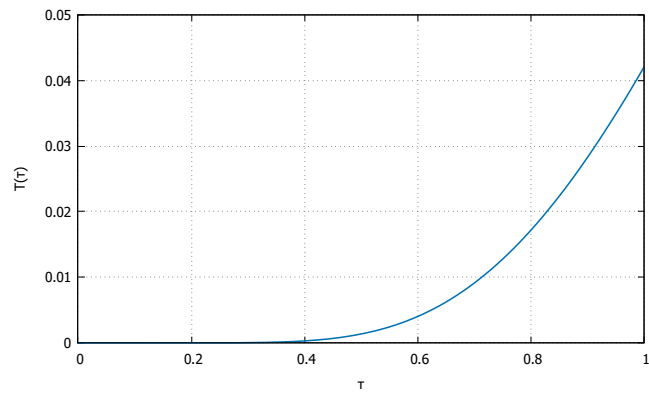


Abbildung 7: Darstellung von $T(\tau)$ für $V_0 = 30$ im Zeitraum $\tau \in [0, 1]$.

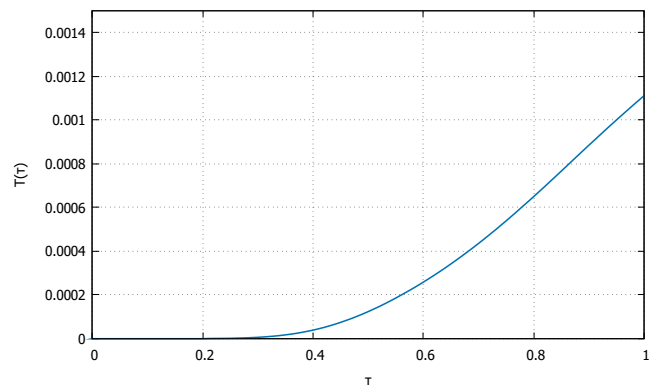


Abbildung 8: Darstellung von $T(\tau)$ für $V_0 = 50$ im Zeitraum $\tau \in [0, 1]$.

Aufgabe 2: Poisson-Gleichung

a)

Das elektrische Feld $\vec{E}(x, y)$ wird bestimmt mit der symmetrischen Differenzenquotienten

$$\partial_x \phi(x, y) = \frac{\phi(x + \Delta, y) - \phi(x - \Delta, y)}{2\Delta}$$

und analog für die y -Komponente. Am Rand könnte lediglich der einfache Differenzenquotient verwendet werden, wegen der groben Wahl von $\Delta = 0.05$ wird darauf jedoch verzichtet.

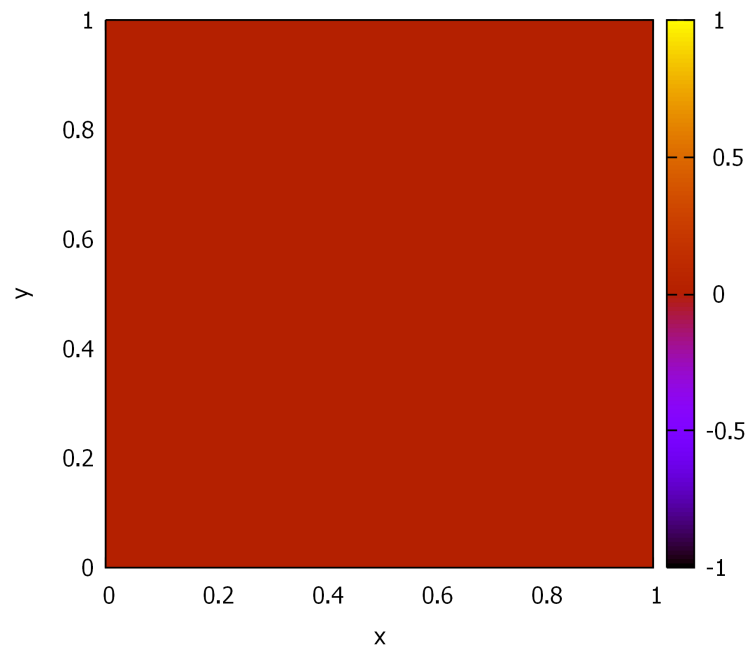


Abbildung 9: Wärmeplot des Potentials $\phi(x, y)$. Für die Randbedingungen $\phi(x, y) = 0$ auf allen vier Rändern ist die Lösung gegeben durch $\phi(x, y) = 0$.

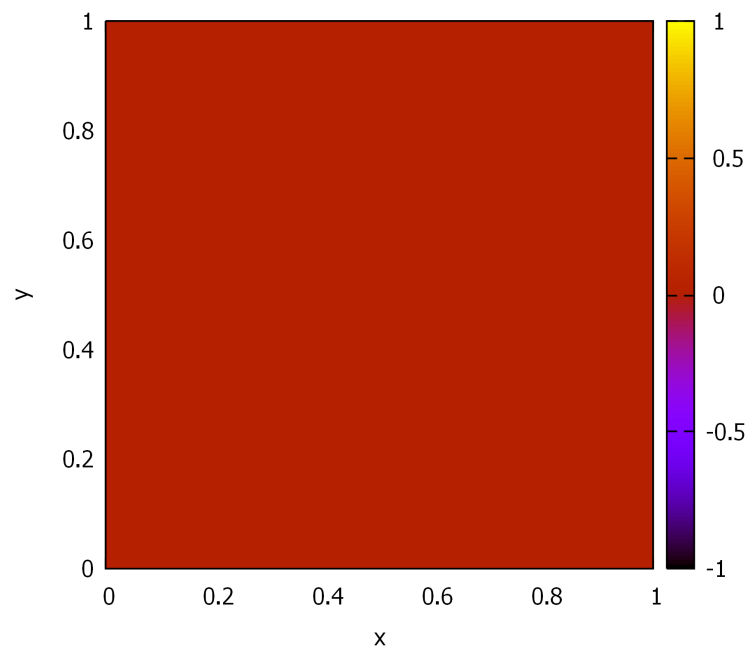


Abbildung 10: Wärmeplot des elektrischen Felds $|\vec{E}|(x, y)$. Da das Potential an allen Stellen verschwindet, ist auch das elektrische Feld konstant Null.

b)

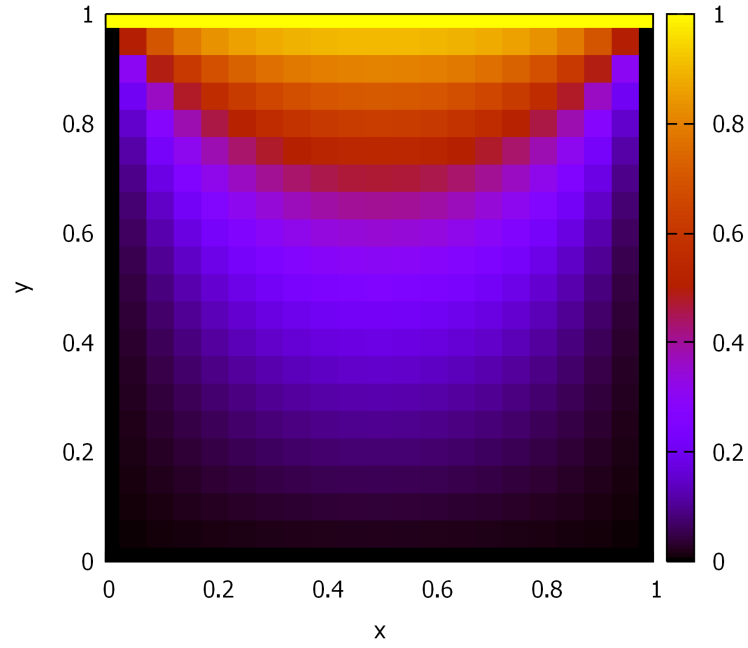


Abbildung 11: Lösung der Poisson-Gleichung mit den Randbedingungen $\phi(x, 1) = 1$ und $\phi(x, y) = 0$ an den anderen drei Rändern bei einer Diskretisierung der Ortskoordinaten in $\Delta = 0.05$, dargestellt in einem Wärmeplot.

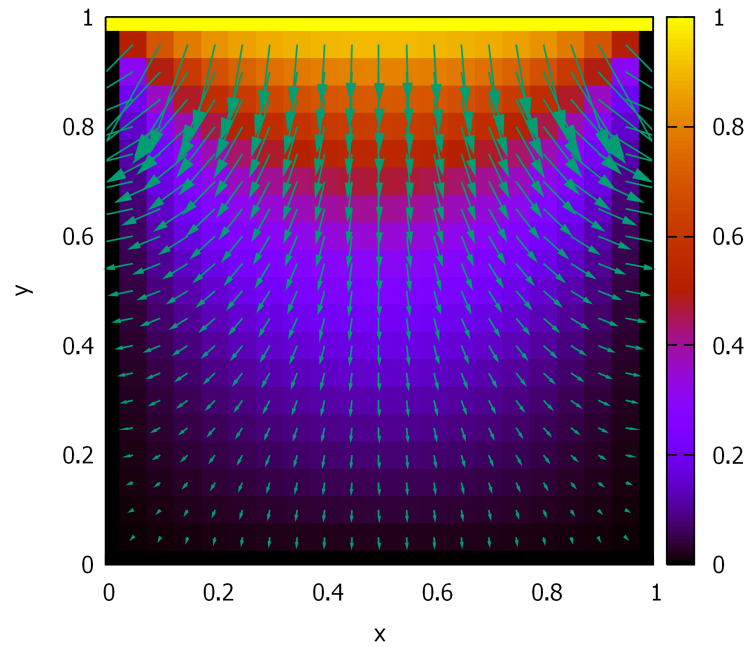


Abbildung 12: Darstellung des elektrischen Feldes $\vec{E}(x, y) = -\nabla\phi(x, y)$ entlang des Potentials $\phi(x, y)$.

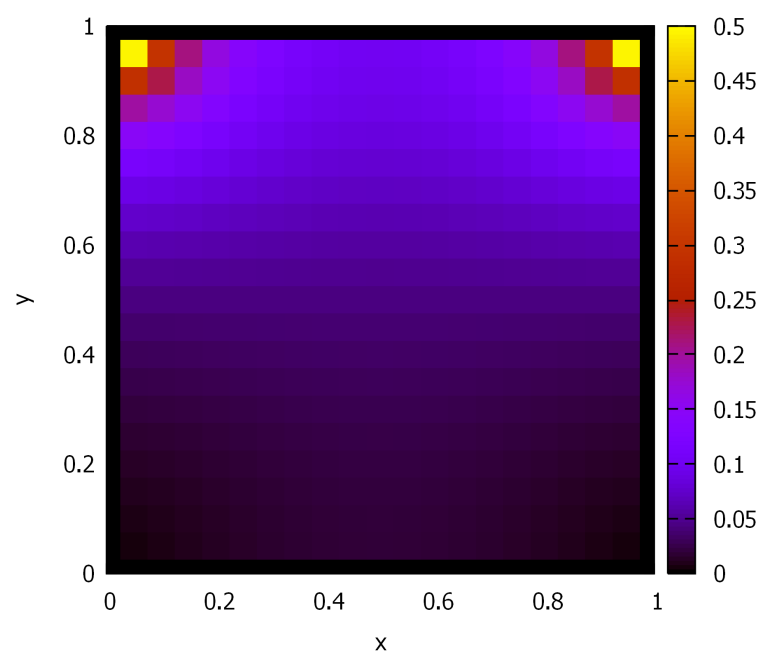


Abbildung 13: Darstellung des elektrischen Felds $|\vec{E}|(x, y)$.

Für engagierte Studenten

Betrachtet wird die analytische Lösung der Poisson-Gleichung

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

mit $\rho(x, y) = 0$ und den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \phi(0, y) = \phi(1, y) = \phi(x, 0) = 0 \\ \phi(x, 1) = 1 \end{aligned}$$

Hierzu wird ein Separationsansatz gewählt:

$$\phi(x, y) = v(x)w(y).$$

Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} v''(x)w(y) + v(x)w''(y) &= 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{v''(x)}{v(x)} &= \frac{w''(y)}{w(y)} = \lambda \end{aligned}$$

mit $\lambda = \text{const.}$ Die beiden gefundenen Differentialgleichungen sind nun in x - und y -Koordinaten separiert und können getrennt behandelt werden. Die Lösungen lauten

$$\begin{aligned} v(x) &= a_k \cos(k\pi x) + b_k \sin(k\pi x) \\ w(y) &= A_k e^{k\pi y} + B_k e^{-k\pi y}. \end{aligned}$$

Aus den Randbedingungen folgt

$$\begin{aligned} v(0) = 0 &\rightarrow a_k = 0 \\ v(1) = 0 &\rightarrow k \in \mathbb{Z} \\ w(0) = 0 &\rightarrow A_k = -B_k \end{aligned}$$

Demnach ist

$$\begin{aligned} v_k(x) &= b_k \sin(k\pi x), \quad k \in \mathbb{Z} \\ w_k(y) &= A_k (e^{k\pi y} - e^{-k\pi y}) = 2A_k \sinh(k\pi y). \end{aligned}$$

Die Lösung für ϕ ergibt sich aus einer Überlagerung aller gefundenen Lösungen:

$$\phi(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} \underbrace{2A_k b_k}_{a_k} \sinh(k\pi y) \sin(k\pi x).$$

Nun wird die letzte Randbedingung ausgewertet. Wir verwenden $c_k = a_k \sinh(k\pi)$, sodass

$$\phi(x, 1) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \sin(k\pi x) = 1.$$

$\phi(x, 1)$ besitzt gerade die Gestalt einer Fourierreihe, welche in allgemeiner Form gegeben ist durch

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$$

Ein einfacher Koeffizientenvergleich zeigt, dass in $\phi(x, 1)$ alle Faktoren $a_n \forall n$ verschwinden müssen. Die restlichen Koeffizienten lassen sich bestimmen über

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin(k\pi x) dx \\ &= 2 \int_0^1 \sin(k\pi x) dx \\ &= \frac{2(1 - \cos(k\pi))}{k\pi} \end{aligned}$$

Mit gefundenem c_k , $a_k = c_k / \sinh(k\pi)$ und dem Übergang $k \rightarrow n$ findet sich schließlich

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

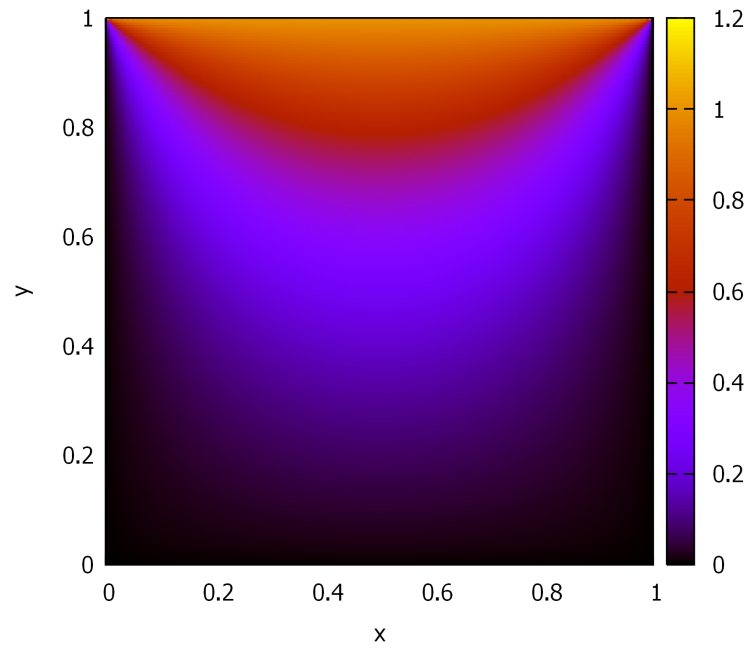


Abbildung 14: Darstellung der gefundenen analytischen Lösung für das Potential $\phi(x, y)$ unter gegebenen Randbedingungen in einem Wärmeplot. Die Summe wurde hier numerisch bis zum 200. Summanden ausgewertet.

c)

Die Randbedingungen werden nun wieder so gesetzt, dass das Potential an allen Rändern verschwindet. Zusätzlich wird nun jedoch eine Ladung im Inneren des betrachteten Systems platziert.

Die Punktladung induziert eine Ladungsdichte

$$\rho(\vec{r}) = q_1 \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_i).$$

Die Delta-Funktion muss für numerische Zwecke approximiert werden. Wir wählen die primitivste Art, eine Stufen-Funktion. Um die Normierungsbedingung zu erfüllen, entsteht ein Korrekturfaktor $1/\Delta^2$:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \delta(x - x_i) \cdot \delta(y - y_i) \approx \frac{1}{\Delta^2} \chi_{[x_i - \Delta/2, x_i + \Delta/2]}(x) \cdot \chi_{[y_i - \Delta/2, y_i + \Delta/2]}(y)$$

wobei

$$\chi_{[x_1, x_2]}(x) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } x \in (x_1, x_2) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Dann ergibt sich für die Ladungsdichte der Ausdruck

$$\rho(\vec{r}) \approx \frac{q_1}{\Delta^2} \cdot \chi_{[x_i - \Delta/2, x_i + \Delta/2]}(x) \cdot \chi_{[y_i - \Delta/2, y_i + \Delta/2]}(y)$$

Die Abbruchbedingung (Genauigkeit 10^{-5}) in der Iteration wird für jeden diskretisierten Bereich gefordert.

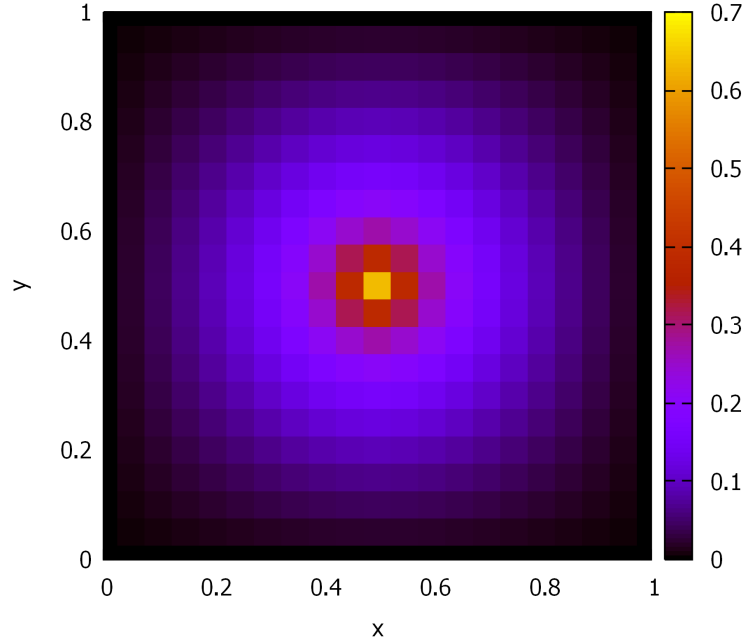


Abbildung 15: Lösung der Poisson-Gleichung mit den Randbedingungen $\phi(x, y) = 0$ an allen Rändern bei einer Diskretisierung der Ortskoordinaten in $\Delta = 0.05$, dargestellt in einem Wärmeplot. Im Zentrum des Systems wird eine Punktladung $q_1 = +1$ platziert.

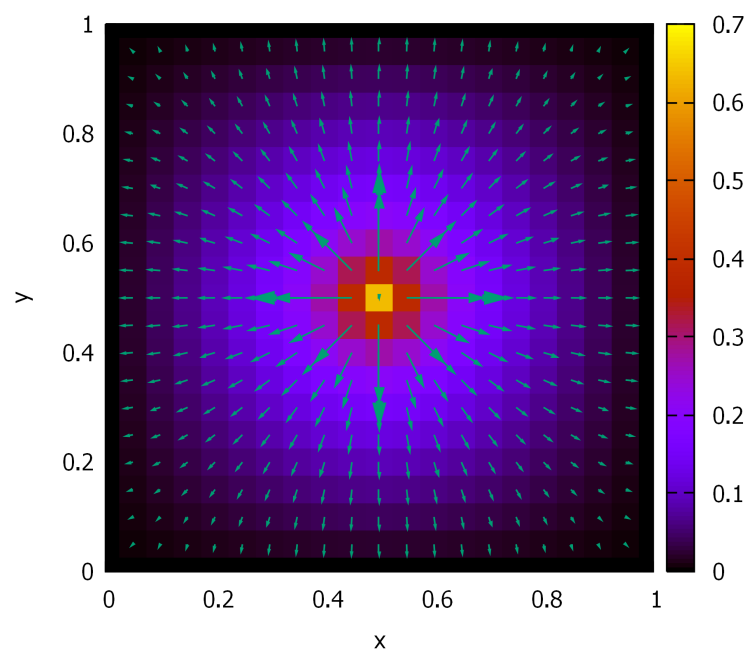


Abbildung 16: Darstellung des elektrischen Feldes $\vec{E}(x, y) = -\nabla\phi(x, y)$ entlang des Potentials $\phi(x, y)$ bei einer im Zentrum platzierten Zentralladung.

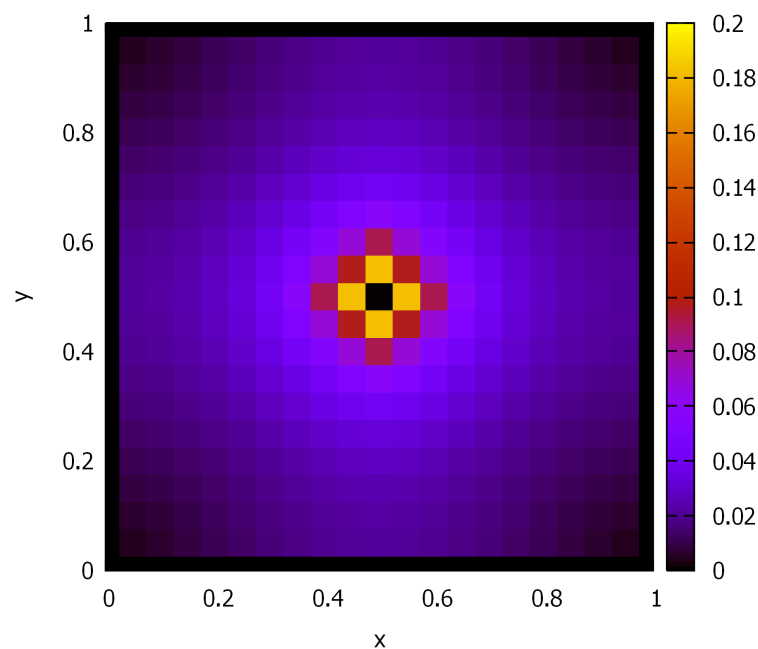


Abbildung 17: Darstellung des elektrischen Felds $|\vec{E}|(x, y)$ bei einer im Zentrum platzierten Punktladung.