Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 6

Ausgabe: 27.05.2016

Abgabe: 03.06.2016

Aufgabe 1. Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (20 P.)

Es soll die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens in einer Dimension mit der Wellenfunktion $\psi(x,t)$ in einem harmonischen Oszillatorpotential simuliert werden. Dazu wird die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

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

numerisch integriert. Der Anfangszustand 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 ($\xi = \alpha x$), um die Schrödinger-Gleichung (1) in die Form

$$\mathrm{i}\partial_\tau\psi = -\partial_\xi^2\psi + \xi^2\psi = \hat{\tilde{H}}\psi \tag{3}$$

zu bringen? 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-Nicholson-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

$$H_{nm} = -\frac{1}{\Delta\xi^2}\left(\delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} - 2\delta_{nm}\right) + \Delta\xi^2n^2\delta_{n,m} \tag{5}$$

gegeben. Der diskretisierte Zeitentwicklungsoperator für einen Zeitschritt der Länge Δt nach Crank und Nicholson 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 $\Delta\tau = 0.02$ 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].

Abgabe: Welche Dimension haben die Matrizen H und S_H?

c) Der Anfangszustand soll ein normiertes Gauß-Paket

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

mit

$$\langle\xi\rangle = \int \mathrm{d}\xi\, \xi |\psi(\xi, 0)|^2 = \xi_0 \,, \tag{8}$$

$$\langle(\xi - \xi_0)^2\rangle = \sigma \tag{9}$$

sein. Wie lautet der diskretisierte Anfangszustandsvektor mit den Komponenten $\psi_j(0) \equiv \psi(\xi_j, 0)$, der diesem Anfangszustand entspricht und welche Dimension hat er? Verwenden Sie $\xi_0 = \sigma = 1$.

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

d) Berechnen Sie für den Anfangszustand (7) den Zustand zum Zeitpunkt $t = 10$ durch fortgesetzte Matrixmultiplikation mit dem Zeitentwicklungsoperator (6). Prüfen Sie, ob der Zustand während der Zeitentwicklung normiert bleibt.

Abgabe: Plot von $\left|\psi_j(10)\right|^2$ als Funktion von j und Plot der Normierung

$$\sum_j \Delta\xi \left|\psi_j(\tau)\right|^2 \tag{10}$$

als Funktion der Zeit

e) Versuchen Sie den zeitlichen Verlauf der Wellenfunktion zu visualisieren oder zu animieren, indem Sie mindestens sechs Plots der Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb einer Schwingungsperiode anfertigen.

Abgabe: Animation bzw. die sechs Einzelplots

f) Berechnen Sie den Mittelwert

$$\langle\xi\rangle(\tau) = \sum_j \Delta\xi \xi_j \left|\psi_j(\tau)\right|^2 \tag{11}$$

und die Varianz

$$\langle\xi^2\rangle(\tau) - \langle\xi\rangle^2(\tau) \tag{12}$$

während der Bewegung für $\tau \in [0, 10]$.

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

Berechnen Sie außerdem den Mittelwert und die Varianz des zu $\hat{\xi}$ gehörigen „Impulsoperators“

$$\hat{p}_\xi \equiv -\mathrm{i}\partial_\xi \,. \tag{13}$$

Abgabe: Plots des zeitlichen Verlaufs des Mittelwerts und der Varianz von ξ und des Impulses und Diskussion der Ergebnisse vor dem Hintergrund der klassischen Bewegung im Oszillatorpotential und der Heißenbergschen Unschärferelation

Freiwillige Zusatzaufgaben: (+5 P.)

g) Verwenden Sie ein einfaches explizites Schema anstelle des Crank-Nicholson-Zeitentwicklungsoperators (6) und vergleichen Sie die Ergebnisse, inbesondere die Normierung. **Abgabe:** Plot der Normierung

$$\sum_j \mathit{\Delta}\xi \left|\psi_j(\tau)\right|^2 \tag{14}$$

als Funktion der Zeit

h) Fügen Sie noch eine kleine Anharmonizität

$$V_{nm} = +\epsilon\,(\mathit{\Delta}\xi)^4\, n^4 \delta_{n,m} \tag{15}$$

zum Hamiltonian (5) hinzu und vergleichen Sie das Verhalten des Wellenpakets.

Abgabe: Plot mit zeitlichem Verlauf des Mittelwerts von ξ für $\epsilon = 0,01$ zusammen mit dem Ergebnis für $\epsilon = 0$ im selben Plot zum Vergleich

Aufgabe 2. Poisson-Gleichung (20 P.)

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

$$\left(\partial_x^2 + \partial_y^2\right)\phi(x,y) = -\rho(x,y) \tag{16}$$

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

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

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_i q_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\,. \tag{17}$$

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

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 $y = 1$. Leiten Sie auch die analytische Lösung für $\phi(x, y)$ her und vergleichen Sie das analytische Ergebnis mit Ihrem numerischen Resultat.

   Hinweis: Verwenden Sie für die analytische Lösung eine Fourier-Zerlegung (siehe Vorlesung) oder einen Separationsansatz.

   Abgabe: Plots der numerischen und analytischen Ergebnisse für $\phi(x, y)$, analytische Herleitung für $\phi(x, y)$ und 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 $|\boldsymbol{E}|(x, y)$

d) Berechnen Sie numerisch die auf dem Rand influenzierte Ladungsdichte σ über die Normalkomponente des Feldes

$$\sigma = -\boldsymbol{n} \cdot \nabla\phi = E_n \,. \tag{18}$$

   Berechnen Sie hiermit numerisch das Linienintegral

$$\int_{\partial Q} \mathrm{d}\ell\, \sigma, \tag{19}$$

   also das zweidimensionale Analogon zur Oberflächenladung in drei Dimensionen.

   Wie lautet das theoretische Ergebnis für diese influenzierte Oberflächenladung?

   Abgabe: Theoretisches und numerisches Ergebnis des Linienintegrals

e) Wählen Sie eine neutrale Ladungskonfiguration mit mindestens zwei Ladungen und der Randbedingung $\phi = \text{const} = 0$ auf allen Rändern. Führen Sie wieder die Aufgabenteile c und d durch.