# Computerphysik WS 2013/2014

**Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin**

# Übungsblatt 9: Differentialgleichungen und Eigenwertprobleme

Alexander Schlaich, Matej Kanduč
18. Dezember 2013

## Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 05.01., 24:00 Uhr.**

## 9.1: Ballistische Gleichung - Kanonenkugel (10 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir die Lösung einer ballistischen Bewegungsgleichung. Auf ein sich durch die Luft bewegendes Projektil wirken sowohl die Gravitationskraft, $m\vec{a} = \vec{F}_r + \vec{F}_g$, als auch die Reibungskraft, $\vec{F}_r/m = -kv^2\vec{e}_{\vec{v}}$. Dabei ist $v$ die Geschwindigkeit des Projektils und die Reibungskraft wirkt entgegen der Bewegungsrichtung, $\vec{e}_{\vec{v}}$. Daraus ergeben sich die Komponenten der Bewegungsgleichung,

$$\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t} = -kvv_x, \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t} = -kvv_y - g. \tag{2}$$

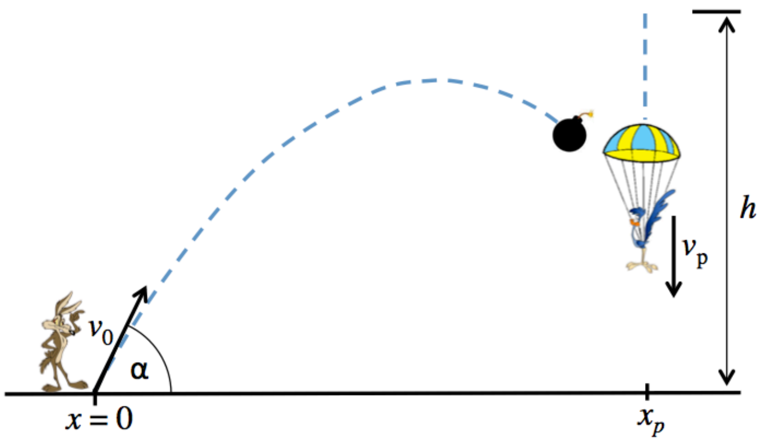


Abbildung 1: Illustration der Aufgabenstellung - Mittels der Kanone am Ursprung des Koordinatensystems soll der fallende Fallschirmspringer getroffen werden.

Wir wollen nun mit unserer Kanone auf ein sich bewegendes Ziel (Fallschirmspringer) zielen. Dieser befindet sich in einem stationären freien Fall mit $v_p = 1\,\mathrm{m/s}$ und ist zur Zeit $t = 0$ in einer Höhe von

$h = 50\,\mathrm{m}$ und $x_p = 200\,\mathrm{m}$ von der Kanone entfernt. Die Abschussgeschwindigkeit der Kanonenkugel beträgt $v_0 = 100\,\mathrm{m/s}$. Die Erdbeschleunigung beträgt $g = 9.8\,\mathrm{m/s^2}$ und der Reibungskoeffizient der Kanonenkugel sei $k = 0.004/\mathrm{m}$.

- **Aufgabe 9.1.1 (5 Punkte):** Lösen Sie die Differentialgleichungen für $x(t)$ und $y(t)$ mittels einer Runge-Kutta Methode.
- **Aufgabe 9.1.2 (5 Punkte):** Welcher Abschusswinkel $\alpha$ ist nötig um den Fallschirmspringer zu treffen? Auf welcher Höhe wird dieser dann getroffen?

## 9.2: Eigenwertprobleme - Schrödingergleichung (10 Punkte)

Gegeben sei die 1-dimensionale Schrödingergleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E \cdot \Phi(x). \tag{3}$$

Das Eigenwertproblem kann für gebundene Zustände und einen endlichen Bereich gelöst werden, indem die Schrödingergleichung numerisch gelöst wird. Betrachten Sie zunächst das Potential

$$V(x) = 2,5 \cdot 10^{-4} x^8. \tag{4}$$

Für die resultierende Wellenfunktion gilt dann wie auch beim harmonischen Oszillator

$$\Phi(x) = 0 \qquad \text{und} \qquad \mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}x = 0 \qquad \text{für} \qquad x \to \infty. \tag{5}$$

Wir betrachten das Intervall $[-6, 6]$ und nähern die Randbedingung mit $\Phi(\pm 6) = \mathrm{d}\Phi(\pm 6)/\mathrm{d}x = 10^{-10}$ und verwenden atomare Einheiten, $\hbar = m = 1$.

- **Aufgabe 9.2.1 (5 Punkte):** Nutzen Sie ein Verfahren Ihrer Wahl um die Schrödingergleichung mit den o.g. Randbedingungen numerisch zu lösen. Beginnen Sie dazu mit einem geschätzten Startwert $E^*$ für den Energieeigenwert $E$ und variieren Sie $E^*$ so, dass die Randbedingungen erfüllt werden. Sie können hierfür z.B. wieder das Bisektionsverfahren verwenden. Berechnen Sie damit die ersten fünf Energieeigenwerte des Oszillators.

  Plotten Sie die zugehörigen Eigenfunktionen in einen Graphen.

*Hinweis:* Sie können in dieser Aufgabe wieder ein Vorwärts-/Rückwärts- Runge–Kutta Verfahren verwenden oder beispielsweise auch die Methode
`scipy.integrate.odeint(schrod_deriv, y0, x,args=(E,V))` verwenden. Machen Sie sich dazu mit der Dokumentation vertraut. Die Funktion `schrod_deriv` liefert dabei das System von Differentialgleichungen erster Ordnung zurück, `y0` sind die Startwerte und `x` die gewünschten $x$-Werte. Mittels dem Argument `args` lassen sich Argumente an die Funktion `schrod_deriv` übergeben.

Im folgenden wollen wir nun einen rechteckigen Potentialtopf annähern. Warum kommt es dabei numerisch zu Schwierigkeiten? Ein endlicher rechteckiger Potentialtopf lässt sich dabei durch die Reihe

$$V_{\text{square}}(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{\sin\left(2\pi(2k-1)fx\right)}{(2k-1)} \tag{6}$$

annähern, wobei die Frequenz $f = 1/\frac{L}{2}$ durch die Breite $L$ gegeben ist.

- **Aufgabe 9.2.2 (5 Punkte):** Bestimmen Sie die ersten 5 Eigenwerte der Schrödingergleichung im Potential $V_{\text{square}}(x)$ für $L = 8$ und $k_{\text{max}} = \{10, 40, 100\}$. Plotten Sie dazu zuerst das Potential um sicherzugehen dass Sie ein Kastenpotential annähern.

  Plotten Sie die zu den fünf niedrigsten Eigenwerten gehörigen Eigenfunktionen in einen Graphen. Diese Rechnung benötigt mehrere Minuten. Vergleichen Sie die erhaltenen Eigenwerte mit der analytischen Lösung des unendlichen Potentialtopfes.

*Hinweis:* Natürlich können Sie die Eigenwertprobleme in dieser Aufgabe auch wie in der Vorlesung gezeigt durch Integrieren von beiden Seiten lösen. In wiefern unterscheiden sich die beiden Verfahren? Erläutern Sie die numerischen Vorteile dieser Methode und Vergleichen Sie die erhaltenen Eigenwerte. Wenn Sie beide Methoden implementieren und Vergleichen können Sie in dieser Aufgabe bis zu **5 Bonuspunkte** erhalten.