

# Computerphysik

## Hausarbeit 2

Friedrich Hübner 2897111

Fiona Paulus 2909625

7. Juni 2017

## Allgemeine Hinweise

Das Programm wurde unter Windows 10 mit "g++ -o abgabe2.exe -Wall -Wextra -std=c++0x -O2 -static abgabe2.cpp" kompiliert.

Das Programm wird gestartet mit 'abgabe2 a V0', wobei a in pm und V0 in eV ist.

## Aufgabe 1

Da  $z = q \cdot a$  und sowohl  $q \geq 0$  als auch  $a > 0$  folgt:  $z \geq 0$ .

Weiterhin wird  $q$  maximal bei  $E = 0$  mit  $z_{\max} = a q_{\max} = a \frac{\sqrt{2m_e V_0}}{\hbar} = \xi$ . Also ist  $0 \leq z \leq \xi$ .

## Aufgabe 2

Da  $\frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z} \geq 0$  müssen auch  $\tan z$  bzw.  $-\cot z$  positiv sein. Der Tangens ist nicht-negativ auf den Intervallen  $[k\pi, k\pi + \frac{\pi}{2})$ , der negative Cotangens auf  $[k\pi + \frac{\pi}{2}, (k+1)\pi)$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ .

Auf den angegebenen Intervallen sind beide Funktionen auch stetig und streng monoton steigend:  $\tan' z = \frac{1}{\cos^2 z} > 0$ ,  $-\cot' z = \frac{1}{\sin^2 z} > 0$ .

Weiterhin ist  $\frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}'}{z} = -\frac{z\sqrt{\xi^2 - z^2} + \frac{z}{\sqrt{\xi^2 - z^2}}}{\xi^2 - z^2} < 0$  und somit ist  $\frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z}$  streng monoton fallend.

**gerader Fall:**  $g(z) = \tan z - \frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z}$

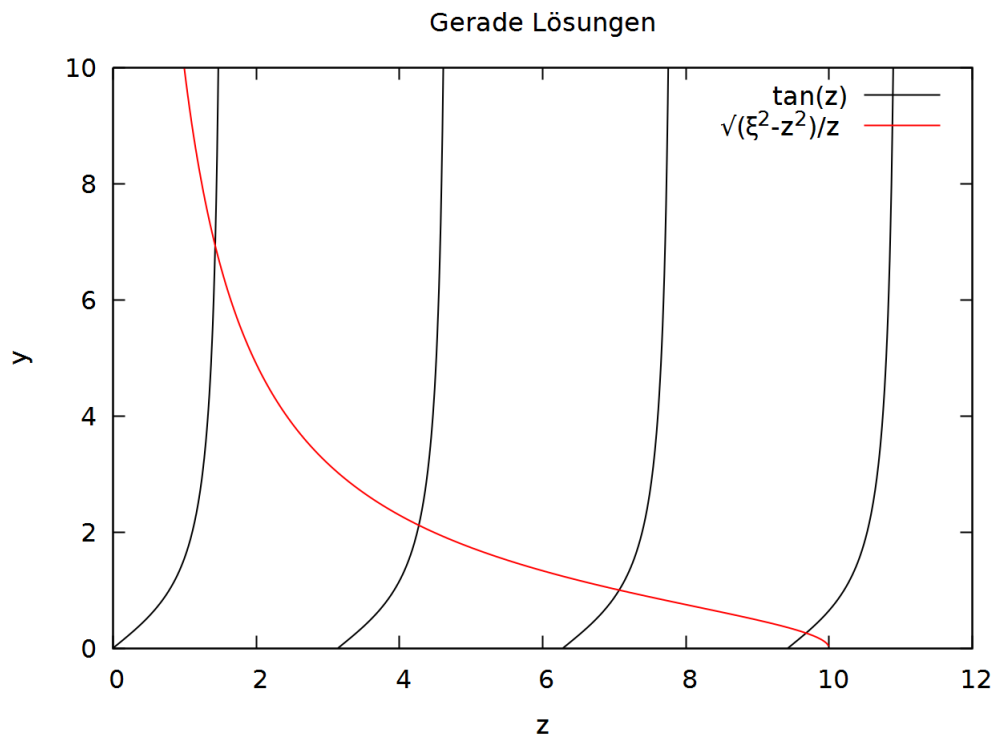


Abbildung 1: Gerader Fall  $\xi = 10$

In dem Diagramm wurden sowohl  $\tan z$  als auch  $\frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z}$  eingezeichnet. Jeder Schnittpunkt entspricht einer Lösung. Wie man gut erkennen kann, gibt es auf jedem Arm des Tangens einen Schnittpunkt.

Betrachte also ein Intervall  $I_k = [k\pi, k\pi + \frac{\pi}{2})$  auf dem die Funktion definiert ist, also  $0 \leq k\pi + \frac{\pi}{2} < \xi$ .

Es gilt  $\lim_{z \rightarrow k\pi^+} g(z) = \lim_{z \rightarrow k\pi^+} 0 - \frac{\sqrt{\xi^2 - (k\pi)^2}}{k\pi} < 0$  und  $\lim_{z \rightarrow k\pi + \frac{\pi}{2}^-} g(z) = \infty > 0$ . Da  $g(z)$  stetig und streng monoton steigend ist und an den Rändern verschiedene Vorzeichen hat, besitzt  $g(z)$  in dem Intervall  $I_k$  genau eine Nullstelle.

Betrachte nun das letzte Intervall  $I = [k\pi, \xi)$ , mit  $z \leq \xi < k\pi + \frac{\pi}{2}$ . Die linke Intervallgrenze hat wieder einen negativen Funktionswert, die rechte einen positiven:  $\lim_{z \rightarrow \xi^-} g(z) = \tan \xi - 0 > 0$ . Also gibt es auch in diesem Intervall eine Nullstelle.

Insgesamt gibt es somit also  $n = \lfloor \frac{\xi}{\pi} \rfloor + 1$  Nullstellen.

**ungerader Fall:**  $h(z) = -\cot z - \frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z}$

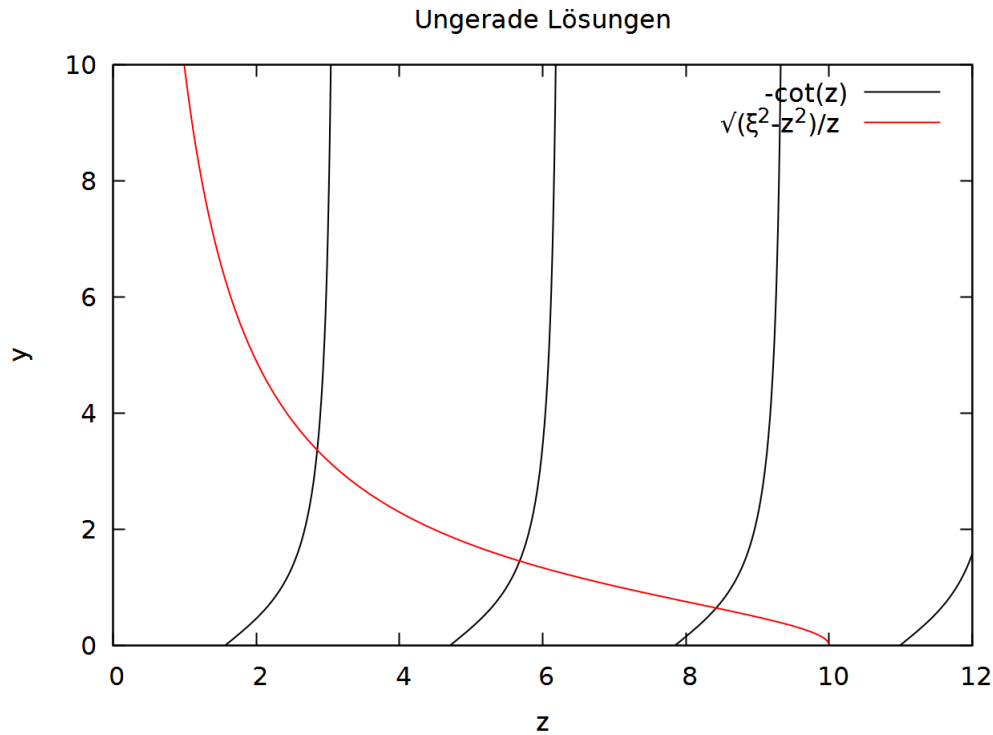


Abbildung 2: Gerader Fall  $\xi = 10$

In dem Diagramm wurden sowohl  $-\cot z$  als auch  $\frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z}$  eingezeichnet. Jeder Schnittpunkt entspricht einer Lösung. Wie man gut erkennen kann, gibt es auf jedem Arm des negativen Cotangens einen Schnittpunkt.

Betrachte also ein Intervall  $J_k = [k\pi + \frac{\pi}{2}, (k+1)\pi)$  auf dem die Funktion definiert ist, also  $0 \leq (k+1)\pi < \xi$ .

Es gilt  $\lim_{z \rightarrow k\pi + \frac{\pi}{2}^+} h(z) = \lim_{z \rightarrow k\pi + \frac{\pi}{2}^+} 0 - \frac{\sqrt{\xi^2 - (k\pi + \frac{\pi}{2})^2}}{k\pi + \frac{\pi}{2}} < 0$  und  $\lim_{z \rightarrow (k+1)\pi^-} h(z) = \infty > 0$ . Da  $h(z)$  stetig und streng monoton steigend ist und an den Rändern verschiedene Vorzeichen hat, besitzt  $h(z)$  in dem Intervall  $J_k$  genau eine Nullstelle.

Betrachte nun das letzte Intervall  $J = [k\pi + \frac{\pi}{2}, \xi)$ , mit  $z \leq \xi < (k+1)\pi$ . Die linke Intervallgrenze hat wieder einen negativen Funktionswert, die rechte einen positiven:  $\lim_{z \rightarrow \xi^-} h(z) = -\cot \xi - 0 > 0$ . Also gibt es auch in diesem Intervall eine Nullstelle.

Insgesamt gibt es somit also  $n = \lfloor \frac{\xi}{\pi} - \frac{1}{2} \rfloor + 1$  Nullstellen.

## **Umsetzung**

Das gesamte Programm befindet sich in `abgabe2.cpp`.

Die Nullstellen werden mit der Bisektionsmethode ermittelt. Dazu werden immer Intervalle  $[k\pi, k\pi + \pi)$  betrachtet und in dem Intervall sowohl die gerade als auch die ungerade Nullstelle berechnet. Diese werden als Liste von Paaren von  $(z, b)$  zurückgegeben, wobei das `double`  $z$  die Nullstelle ist, und  $b$  ein `bool`, der genau dann wahr ist, wenn es eine gerade Lösung ist.

Aufgrund des Algorithmus sind die Nullstellen schon aufsteigend in den  $z$ -Werten sortiert (und damit aufsteigend in den Energiewerten). Da es in der Aufgabenstellung verlangt war, sortieren wir die  $z$ -Werte trotzdem noch mal mit einem selbstprogrammiertem Quicksort-Algorithmus. Danach werden aus den  $z$ -Werten die Energien berechnet und diese ausgegeben.

## **Sonstige Abgegebene Dateien**

### **`plot.plt`**

Die Plot-Datei für die beiden Plots in der Abgabe.