Georg-August-Universität Göttingen
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. F. Heidrich-Meisner
Dr. E. Bothmann
S. L. Villani
SoSe 2021

Übungen zur Vorlesung
Computergestütztes Wissenschaftliches Rechnen
Blatt 11

Lernziele dieses Übungsblattes

- Lösen der 1D zeitunabängigen Schrödingergleichung durch Diskretisierung.
- Variationeller Ansatz: Darstellung bezüglich endlich vieler Basiszustände.

Aufgabenmodus

Die beiden Aufgaben dieser Woche verfügen über keine gesonderten Tutorials.

Prüfungsvorleistung

Die Bearbeitung von Aufgabe 28 ist die vierte und letzte unbenotete Prüfungsvorleistung. Stellen Sie Ihre Bearbeitung bis zum 4. Juli, 12:00 Uhr über Gitlab zur Verfügung.

Ihr/e Tutor/in wird sich dann mit Ihnen in Kontakt setzen und ggf. notwendige Anpassungen mit Ihnen besprechen.

Übungsaufgaben

Aufgabe 27 *Freies Teilchen im Kasten*

Ein Teilchen der Masse m bewege sich frei in einer Dimension zwischen den Wänden eines Kastens der Länge L. Zur numerischen Lösung setzen wir $L = 1$, sowie $\hbar = m = 1$. Wir diskretisieren die Ortsachse mit $x_i = i\Delta x$ für $0 \leq x \leq L$ $(N\Delta x = L)$.

1. Stellen Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}$ als Matrix H in der *computational basis* auf, indem Sie die zweite Ableitung in der Schrödingergleichung durch finite Differenzen ersetzen:
$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x+\Delta x) + \psi(x-\Delta x) - 2\psi(x)}{(\Delta x)^2}\,. \tag{1}$$

2. Bestimmen Sie die Eigenwerte E_α und Eigenvektoren $\boldsymbol{\psi}_\alpha$ von H für $N = 500$ (Sie können dazu die `LAPACKE_dsyev`-Funktion aus der LAPACK-Bibliothek verwenden). Beachten Sie dabei, dass $\psi(0) = \psi(L) = 0$ gilt. Vergleichen Sie die ersten zwanzig Eigenwerte mit der exakten analytischen Lösung des Systems. Plotten Sie die ersten drei Eigenvektoren.

3. Variieren Sie dazu Δx zwischen 1 und 10^{-3} und plotten Sie den Fehler für die ersten vier Eigenwerte, d.h. das Verhältnis der numerisch bestimmten Eigenwerte zu den analytisch bestimmten Eigenwerten.

Aufgabe 28 *(An)harmonischer Oszillator* (Prüfungsvorleistung)

Der Hamiltonoperator eines ungestörten harmonischen Oszillators mit Masse m und Eigenfrequenz $\omega/(2\pi)$ lautet

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

Dabei ist $\hat{x}$ der Ortsoperator und $\hat{p}$ der Impulsoperator. Wir fügen nun eine Störung hinzu, so dass der Gesamt-Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ lautet, wobei

$$\hat{H}' = g\hat{x}^4$$

mit einer Konstanten g, die die Stärke der Störung bestimmt. Verwenden Sie $\hbar = \omega = m = 1$.

1. Bestimmen Sie numerisch die Eigenwerte und Eigenvektoren für den Fall $g = 0$, indem Sie die x-Achse diskretisieren mit $x_i = i\Delta x - L$ für $-L \leq x < L$ ($N\Delta x = 2L$) und $\hat{H}_0$ als Matrix H in der *computational basis* aufstellen und diagonalisieren. Dazu kann wie in Aufgabe 27 LAPACK verwendet werden. Verwenden Sie $L = 5$ und $N = 500$. Plotten Sie die 20 niedrigsten Eigenwerte und vergleichen Sie mit den exakten analytischen Ergebnissen für den ungestörten harmonischen Oszillator. Wieso treten Abweichungen auf? Plotten Sie die Absolutquadrate der Komponenten der ersten drei Eigenvektoren.

2. Betrachten Sie jetzt $g = 0.5$. Wiederholen Sie die Prozedur aus Teil 1 und bestimmen Sie die ersten vier Eigenwerte. Stellen Sie sicher, dass diese bezüglich der Diskretisierung Δx hinreichend konvergiert sind. Variieren Sie dazu Δx zwischen 1 und 10^{-2} und plotten Sie die relativen Residuen für zwei benachbarte Werte von Δx_i und Δx_{i-1}, d.h. $|(E_\alpha(\Delta x_i) - E_\alpha(\Delta x_{i-1}))/E_\alpha(\Delta x_i)|$, für die ersten vier Eigenwerte E_α in Abhängigkeit von Δx_i.

3. Betrachten Sie noch einmal $g = 0.5$ und verwenden Sie dieses Mal den variationellen Ansatz. Stellen Sie dazu $\hat{H}$ in der Eigenbasis von $\hat{H}_0$ auf und verwenden Sie nur die $N = 4, 8, 16, 32, 64, 128$ ersten Eigenvektoren. Diagonalisieren Sie $\hat{H}$ jeweils numerisch und plotten Sie die vier niedrigsten Eigenwerte E^*_α als Funktion von N. Diskutieren Sie das Ergebnis, ist eine Konvergenz erkennbar?

Selbsttest

- Auf welches Problem der linearen Algebra führt die Quantenmechanik?
- Welche Näherungen treten bei der Diskretisierung der Ortsachse auf?
- Welche Rolle spielen die typischen Längenskalen eines Problems in der Analyse der numerischen Ergebnisse?
- Was besagt das Variationsprinzip?

- Wie gelangt man zu einem variationellen Ansatz, der numerisch mit endlich-dimensionalen Matrizen implementiert werden kann?