

Computational Physics Praktikum, WS 2012/13

# Stationäre Schrödingergleichungen: Entwicklung in ein vollständiges Funktionensystem

Nils Schweinsberg

19. November 2012

Betreut durch E. van Dalen

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theorie</b>	<b>2</b>
1.1	Diskretisierung . . . . .	2
1.2	Sphärische symmetrische Diskretisierung . . . . .	3
1.3	Entwicklung der Lösung . . . . .	3
1.4	Numerische Integration . . . . .	4
1.5	Numerische Diagonalisierung . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Auswertung</b>	<b>5</b>
2.1	Besselfunktionen . . . . .	5
2.2	Diagonalisierung . . . . .	5
2.3	Schrödingergleichung eines Nukleons . . . . .	6
2.4	Numerische Stabilität . . . . .	6

# 1 Theorie

In diesem Versuch soll die stationäre Schrödingergleichung gelöst werden:

$$\hat{H}|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle \quad (1)$$

Aus den Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  können anschließend die Wellenfunktionen berechnet werden:

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle \quad (2)$$

## 1.1 Diskretisierung

Wählt man mit  $|n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) ein vollständiges Orthogonalsystem, so kann man den Eigenvektor  $|\alpha\rangle$  in der so gewählten Basis darstellen:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n\alpha} |n\rangle \quad (3)$$

Multipliziert man die Schrödingergleichung von links mit dem Zustand  $\langle m|$  erhält man mit den Koeffizienten  $c_{n\alpha} = \langle n|\alpha\rangle$  die Diskretisierung:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle m|\hat{H}|n\rangle \langle n|\alpha\rangle = E_\alpha \langle m|\alpha\rangle \quad (4)$$

Oder in kompakter Matrix-schreibweise mit  $H_{mn} = \langle m|\hat{H}|n\rangle$ :

$$\sum_{n=1}^{\infty} H_{mn} c_{n\alpha} = E_\alpha c_{m\alpha} \quad (5)$$

Für die Wellenfunktion gilt in dieser Darstellung:

$$\psi_\alpha = \langle x|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n\alpha} \langle x|n\rangle \quad (6)$$

Zur numerischen Berechnung muss man eine geeignete Näherung wählen, die sich auf  $N$  Basiszustände beschränkt. Die diskrete stationäre Schrödingergleichung lautet damit:

$$\sum_{n=1}^N H_{mn} c_{n\alpha} \approx E_\alpha c_{m\alpha} \quad (7)$$

Dieses Problem lässt sich durch diagonalisieren der  $N \times N$ -Matrix  $H_{mn}$  numerisch lösen.

## 1.2 Sphärische symmetrische Diskretisierung

Durch die Wahl des Wood-Saxon-Potentials als sphärisch symmetrisches Potential lässt sich der Winkelanteil der zugehörigen Wellenfunktionen durch Kugelfunktionen darstellen:

$$\langle x | n = \{ilm\} \rangle \propto Y_l^m(\theta, \phi) \quad (8)$$

Der Radialanteil wird durch die sphärischen Besselfunktionen  $j_l(x)$  angegeben. Notwendige Bedingung ist, dass diese auf dem Rand der Box ( $r = R$ ) verschwinden:

$$j_l(k_{il}R) = 0 \quad (9)$$

Die Impulse  $k_{il}$  sind somit diskretisiert (quantisiert). Die Besselfunktionen sind außerdem orthonormal mit dem jeweiligen Normierungsfaktor  $\alpha_{il}$ :

$$\int_0^R r^2 (\alpha_{il} \cdot j_l(k_{il}r)) (\alpha_{jl} \cdot j_l(k_{jl}r)) dr = \delta_{ij} \quad (10)$$

Der Normierungsfaktor beträgt:

$$\alpha_{il} = j\pi \sqrt{2/R^3} \quad \text{für } l = 0 \quad \text{bzw.} \quad (11)$$

$$\alpha_{il} = \frac{\sqrt{2/R^3}}{j_{l-1}(k_{il}R)} \quad \text{für } l > 0 \quad (12)$$

Als (vollständige) Orthonormalbasis erhält man somit:

$$f_{ilm} = \alpha_{il} j_l(k_{il}r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (13)$$

## 1.3 Entwicklung der Lösung

Es gilt, die Matrix  $H_{mn}$  zu diagonalisieren:

$$H_{mn} = \langle m | T | n \rangle + \langle m | V | n \rangle \quad (14)$$

$$\langle i'l'm' | T | ilm \rangle = \delta_{ii'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \frac{(\hbar c)^2}{2Mc^2} k_{il}^2 \quad (15)$$

$$\langle i'l'm' | V | ilm \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \alpha_{i'l} \alpha_{il} \int r^2 V(r) j_l(k_{i'l}r) j_l(k_{il}r) r \quad (16)$$

Der so konstruierte kinetische Teil  $T_{mn}$  ist bereits diagonal, der Potentialteil  $V_{mn}$  ist durch  $V_{mn} \propto \delta_{ll'} \delta_{mm'}$  blockdiagonal. Es reicht also aus, für ein festes  $l$  die Matrix  $H_{ii'}$

zu diagonalisieren. Zu beachten ist dabei, dass die so erhaltenen Zustände  $(2l + 1)$ -fach entartet sind, da sie von  $m$  unabhängig sind.

Die Wellenfunktion kann damit in der in Gl. (13) definierten Basis entwickelt werden:

$$\psi_\alpha(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \alpha \rangle = \sum_{ilm} \langle \vec{x} | ilm \rangle \langle ilm | \alpha \rangle = \sum_{n=\{ilm\}} c_{n\alpha} f_n(\vec{x}) \quad (17)$$

## 1.4 Numerische Integration

Um Integrale numerisch berechnen zu können ist die Diskretisierung in  $N$  äquidistante Abschnitte notwendig:

$$\int_0^R f(r) dr = \left( \frac{1}{2} f(r_0) + \sum_{i=1}^{N-1} f(r_i) + \frac{1}{2} f(r_N) \right) \Delta r \quad (18)$$

Dabei ist  $r_i = i\Delta r$  mit  $i = 0 \dots N$  und  $\Delta r = R/N$

## 1.5 Numerische Diagonalisierung

Zur numerischen Diagonalisierung der Hamilton-Matrix  $H$  wird das Jacobi-Verfahren für symmetrische, quadratische Matrizen verwendet. Dabei wird die Matrix  $H$  in der  $p$ -ten Zeile bzw.  $q$ -ten Spalte verändert:

$$H'_{pp} = c^2 H_{pp} + s^2 H_{qq} - 2sc H_{pq} \quad (19)$$

$$H'_{qq} = c^2 H_{qq} + s^2 H_{pp} + 2sc H_{pq} \quad (20)$$

$$H'_{pq} = H'_{qp} = (c^2 - s^2) H_{pq} + sc(H_{pp} - H_{qq}) \quad (21)$$

Für die Werte mit  $i \neq p, q$  gilt:

$$H'_{pi} = H'_{ip} = c H_{pi} - s H_{qi} \quad (22)$$

$$H'_{qi} = H'_{iq} = c H_{qi} + s H_{pi} \quad (23)$$

Die Variablen  $s$  und  $c$  werden so bestimmt, dass  $H'_{pq} = 0$ :

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} \quad (24)$$

$$s = tc \quad (25)$$

$$t = \frac{\text{sgn}(\theta)}{|\theta| + \sqrt{\theta^2 + 1}} \quad (26)$$

$$\theta = \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{H_{qq} - H_{pp}}{2H_{pq}} \quad (27)$$

Die Transformationsmatrix  $A$  erhält man, indem man diese Rotation mehrfach hintereinander ausführt, also:

$$A = A_{p_1 q_1} \cdot A_{p_2 q_2} \cdot \dots \cdot A_{p_n q_n} \quad (28)$$

## 2 Auswertung

### 2.1 Besselfunktionen

In Aufgabe 1 sollten die sphärischen Bessel-Funktionen als Funktion von  $x$  berechnet werden und deren Nullstellen berechnet werden. Fig. 1 zeigt die ersten 10 Bessel-Funktionen. Die Nullstellen der ersten 100 Bessel-Funktionen befinden sich im Anhang im Unterordner “zero-points”.

Ab der Bessel-Funktion  $j_{67}$  haben die Bessel-Funktionen im Intervall  $x = 0 \dots 100$  keine Nullstellen mehr, also insbesondere auch  $j_{125}$  nicht.

Die Wellenzahlen für  $R = 5$  fm befinden sich ebenfalls im Anhang im Unterordner “wave-numbers”.

Die Orthogonalität der Besselfunktionen konnte ebenfalls gezeigt werden, die Ergebnisse befinden sich im Anhang im Unterordner “ortho”. Es wurde dabei die Differenz zur Einheitsmatrix aufgetragen, also  $|M - 1|$ .

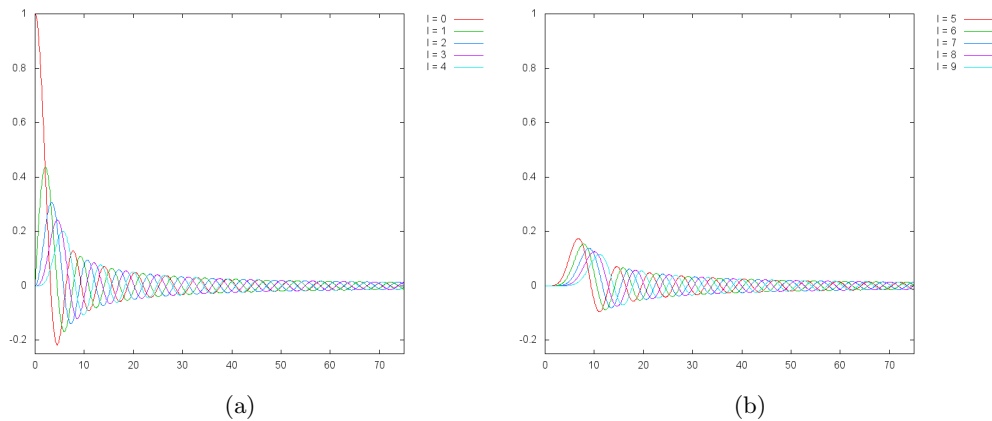


Abbildung 1: Die ersten 10 sphärischen Bessel-Funktionen als Funktion von  $x$

### 2.2 Diagonalisierung

In Aufgabe 2 sollten die Matrizen

$$A_{ij} = \frac{N}{i+j} + i + j \quad (29)$$

für  $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$  diagonalisiert werden. Dazu wurde das Jacobi-Verfahren verwendet. Die Ergebnisse befinden sich im Anhang im Unterordner “diag”.

### 2.3 Schrödingergleichung eines Nukleons

In Aufgabe 3 sollte die Bewegung eines Nukleons im Wood-Saxon-Potential (Fig. 2) eines Atomkerns untersucht werden. Dazu wurden die stationären Lösungen der Schrödingergleichung berechnet. Für eine Box-Größe  $R = 10$  fm erhält man als Ergebnis für die Energien  $E_{l,j}$ :

$$E_{0,1} = -40.37 \text{ MeV} \quad (30)$$

$$E_{0,3} = -4.12 \text{ MeV} \quad (31)$$

$$E_{1,2} = -23.47 \text{ MeV} \quad (32)$$

$$E_{2,2} = -5.43 \text{ MeV} \quad (33)$$

Die genauen Energie-Werte für das jeweilige  $l$  befinden sich im Anhang im Unterordner “energy”.

Mit diesen Lösungen wurden die Wellenfunktionen

$$\Psi_j(r) = \sum_i A_{ij} \cdot \alpha_{i,l} \cdot j_l(k_{i,l} \cdot r) \quad (34)$$

berechnet, wobei  $A$  die Transformationsmatrix aus dem Jacobi-Verfahren ist und  $\alpha_{i,l}$  der Norm-Faktor zur Besselfunktion  $j_l$  und der  $i$ -ten Wellenzahl  $k_{i,l}$ . Das Ergebnis ist in Fig. 3 geplottet. Die genauen Werte befinden sich im Anhang im Unterordner “psi”.

### 2.4 Numerische Stabilität

Zum überprüfen der numerischen Stabilität wurde die Boxgröße und die Zahl der Basisfunktionen angepasst. Es wurden Boxgrößen von  $R = 5$  fm, 10 fm, 15 fm gewählt und die Anzahl der Basisfunktionen  $l_{\max} = 5, 10$  für jeden Wert jeweils variiert.

Für die stationären Energien  $E_{l,j}$  erhält man für  $R = 5$  fm und  $l_{\max} = 5$ :

$$E_{0,0} = -40.33 \text{ MeV} \quad (35)$$

$$E_{0,1} = -1.22 \text{ MeV} \quad (36)$$

$$E_{1,0} = -23.24 \text{ MeV} \quad (37)$$

$$E_{2,0} = -4.35 \text{ MeV} \quad (38)$$

Für  $R = 5$  fm und  $l_{\max} = 10$  gilt:

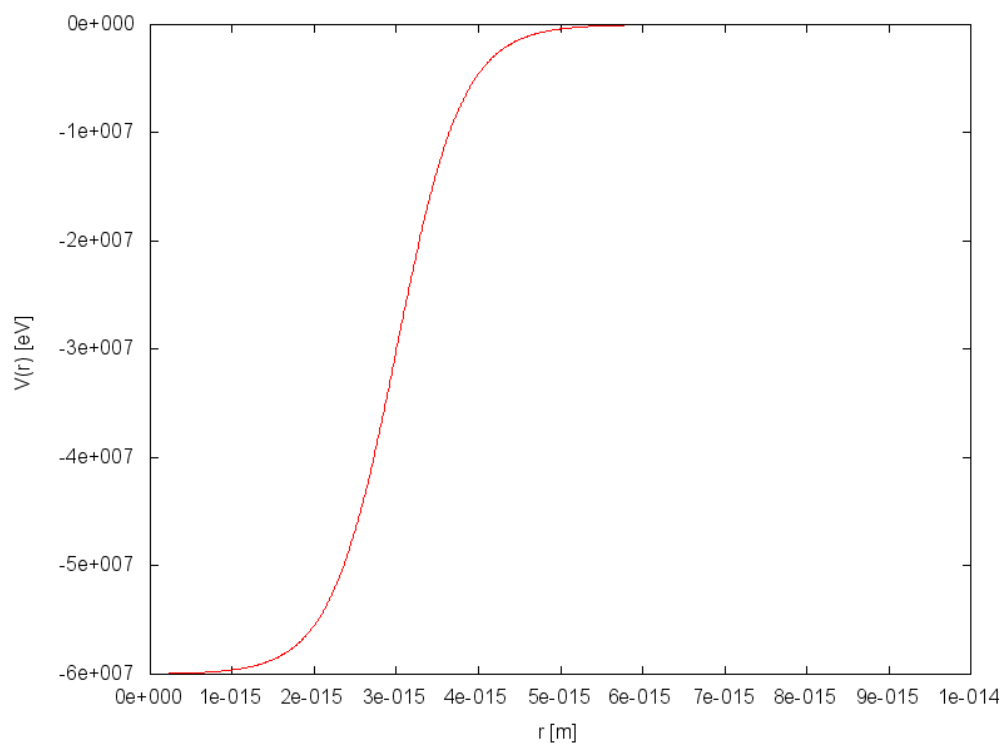


Abbildung 2: Das im Versuch verwendete Wood-Saxon-Potential

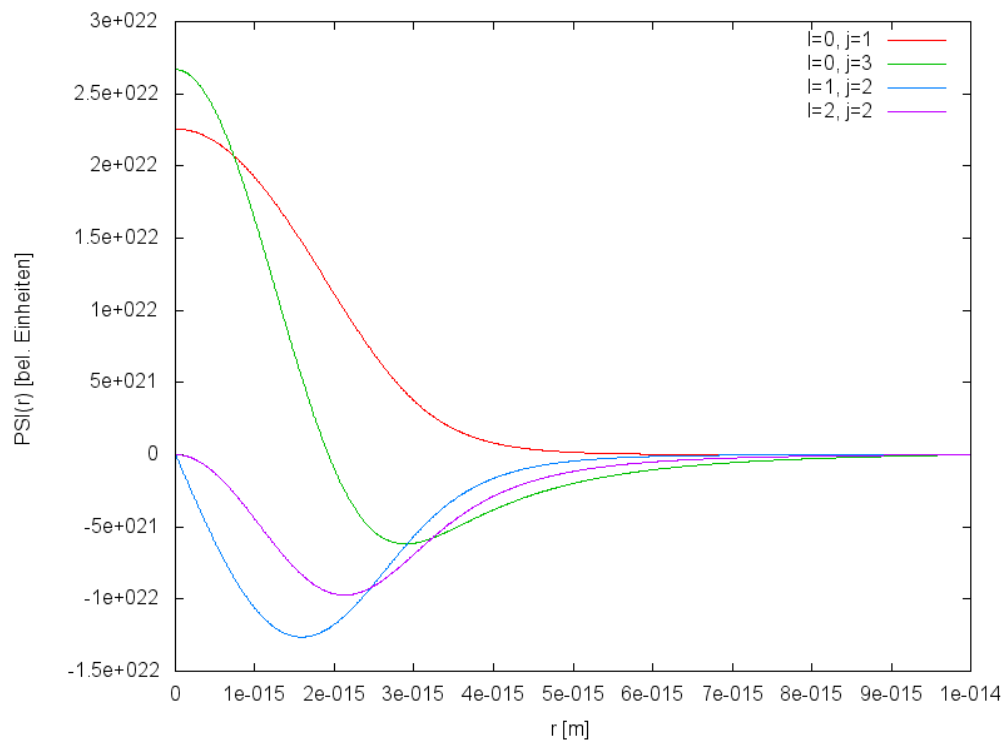


Abbildung 3: Wellenfunktionen  $\Psi_j(r)$  der stationären Lösungen



$$E_{0,0} = -40.34 \text{ MeV} \quad (39)$$

$$E_{0,1} = -1.22 \text{ MeV} \quad (40)$$

$$E_{1,0} = -23.24 \text{ MeV} \quad (41)$$

$$E_{2,0} = -4.35 \text{ MeV} \quad (42)$$

Für  $R = 15 \text{ fm}$  und  $l_{\text{max}} = 5$  gilt:

$$E_{0,2} = -40.37 \text{ MeV} \quad (43)$$

$$E_{0,6} = -4.14 \text{ MeV} \quad (44)$$

$$E_{1,6} = -23.47 \text{ MeV} \quad (45)$$

$$E_{2,5} = -5.43 \text{ MeV} \quad (46)$$

Für  $R = 15 \text{ fm}$  und  $l_{\text{max}} = 10$  gilt:

$$E_{0,2} = -40.37 \text{ MeV} \quad (47)$$

$$E_{0,6} = -4.14 \text{ MeV} \quad (48)$$

$$E_{1,6} = -23.47 \text{ MeV} \quad (49)$$

$$E_{2,5} = -5.43 \text{ MeV} \quad (50)$$

Die stationären Energien  $E_{j,l}$  ändern sich also nicht (nur unwesentlich) mit höherer Ordnung der Basisfunktionen für ein festes  $R$ . Auch die Werte der stationären Energien entsprechen bis auf kleine Abweichungen für  $R = 5 \text{ fm}$  bei den Energien  $E_{0,1}$  und  $E_{2,0}$  den Werten für  $R = 10 \text{ fm}$ . Für  $R = 15 \text{ fm}$  nahezu identisch. Lediglich die Ordnungen des jeweiligen stationären Zustandes ändert sich in Abhängigkeit der Boxgröße  $R$ .

Die Wellenfunktionen entsprechen im wesentlichen der Wellenfunktion für  $R = 10 \text{ fm}$  und  $l_{\text{max}} = 3$  aus Aufgabenteil 2.3.a. Die Wellenfunktion zu  $R = 15 \text{ fm}$  und  $E_{2,5}$  scheint sich jedoch invertiert zu haben.

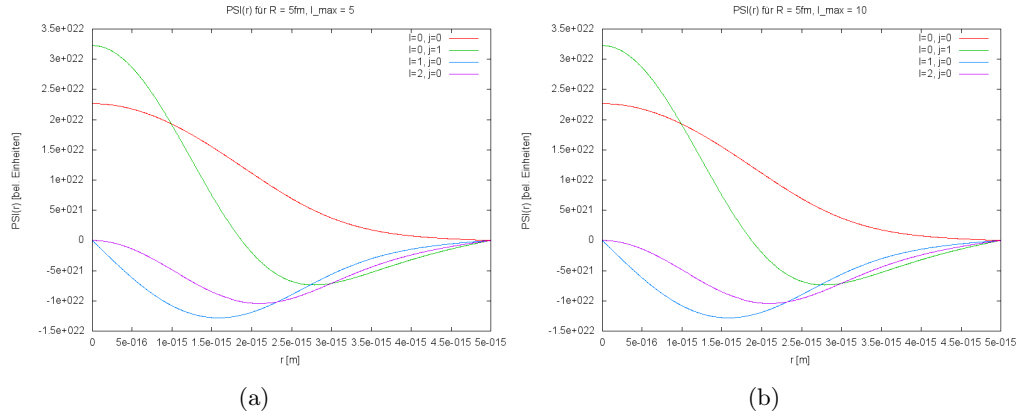


Abbildung 4: Wellenfunktion  $\psi_j(r)$  für  $R = 5$  fm und  $l_{\max} = 5$  (links) bzw.  $l_{\max} = 10$  (rechts)

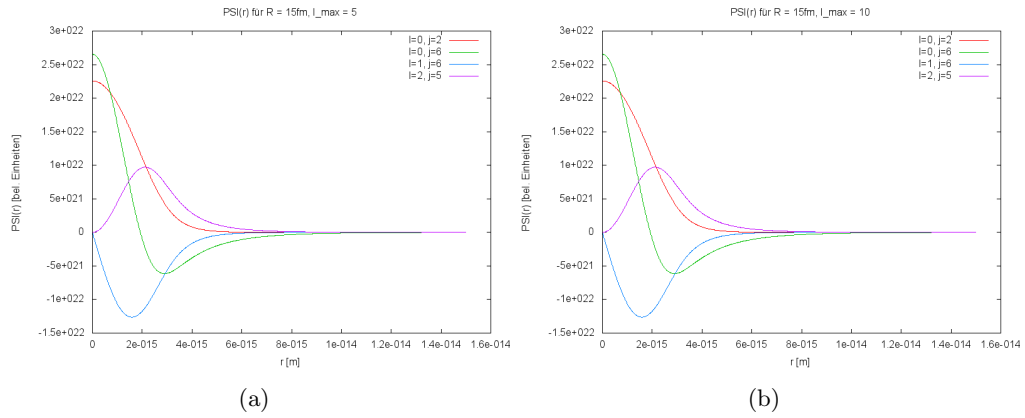


Abbildung 5: Wellenfunktion  $\psi_j(r)$  für  $R = 15$  fm und  $l_{\max} = 5$  (links) bzw.  $l_{\max} = 10$  (rechts)