CiS Projekt

Eindimensionale Schrödingergleichung für beliebiges Potential bei periodischen Randbedingungen

Michael Simon, Hanko Ipach

03.02.2012

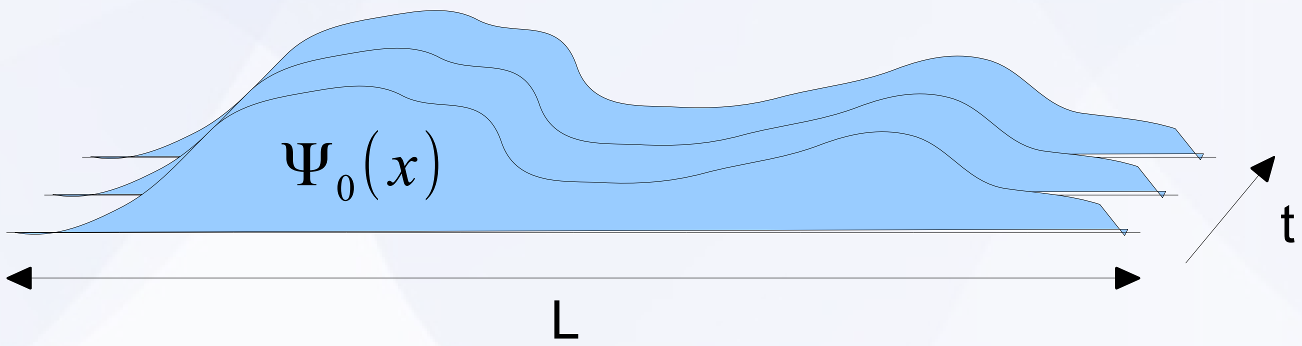
Inhalt

- Problemstellung
- Lösungsansatz
- Programmstruktur
- Live-Demo

Problemstellung

- Schrödingergleichung: $$i\hbar\frac{d\Psi}{dt}=H\Psi$$
- Hamiltonian: $$H=\frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2}{dx^2}+V=T+V$$
- Periodische R.B.: $$\Psi(x,t)=\Psi(x+L,t)$$ $$V(x,t)=V(x+L,t)$$

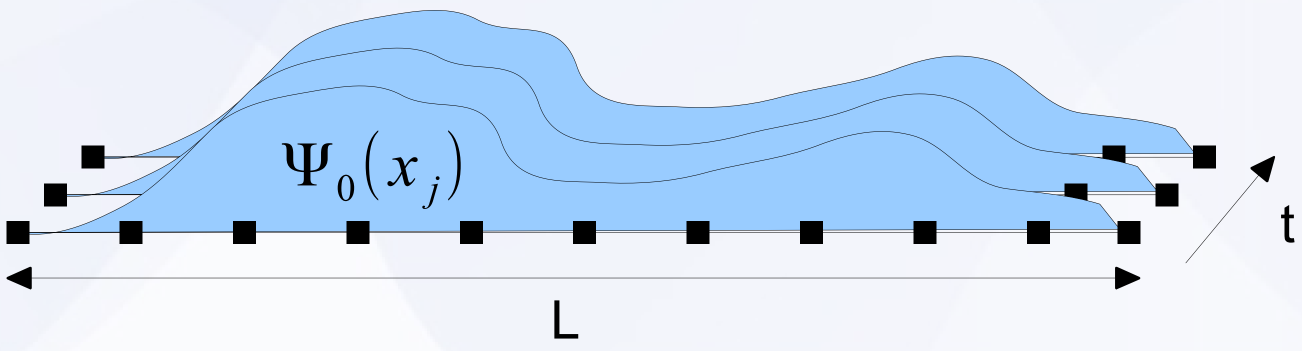
$$\Psi(x,t=0)=\Psi_0(x)\;,\;V=V(x,t)\;:\;\Psi(x,t)=?$$



Lösungsansatz

- Programmiersprache: MATLAB
- Ortsdiskretisierung $x = j \cdot \Delta x \;,\; j = 0, \ldots, n_x$
- Matrixrepräsentation $H = (H)_{i,j} = (T + diag(V))_{i,j}$

$$\Psi = (\Psi)_j$$



Lösungsansatz

- Approximation des kinetischen Hamiltonanteils

$$\left(T\,\Psi\right)_j = \frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{d\,\Psi^2}{dx^2}\right)_j \approx \sum_k T_{jk}\,\Psi_k$$

- 1.) Fourier-Grid-Hamiltonian Method (D. Tannor)
- 2.) Differenzenquotienten

$$\frac{d\,\Psi^2}{dx^2} \approx \frac{\Delta\,\Psi^2}{\Delta\,x^2} = \frac{\Psi\left(x-\Delta\,x\right)-2\,\Psi\left(x\right)+\Psi\left(x+\Delta\,x\right)}{\Delta\,x}$$

Lösungsansatz

- H = konstant:
  - Eigenzustände $H\Psi_n(x,t=0)=E_n\Psi_n(x,t=0)$
  - Zeitentwicklung $\Psi(x,t)=\sum_n c_n \mathrm{e}^{\frac{iE_n t}{\hbar}}\Psi_n(x,t=0)$
- H = H(t):
  - Zeitdiskretisierung $t_k=k\cdot\Delta t\ ,\ k=0,\ldots,n_t$
  - Direkte Zeitentwicklung $i\hbar\frac{d\Psi(x,t)}{dt}=H(t)\Psi(x,t)$

Lösungsansatz

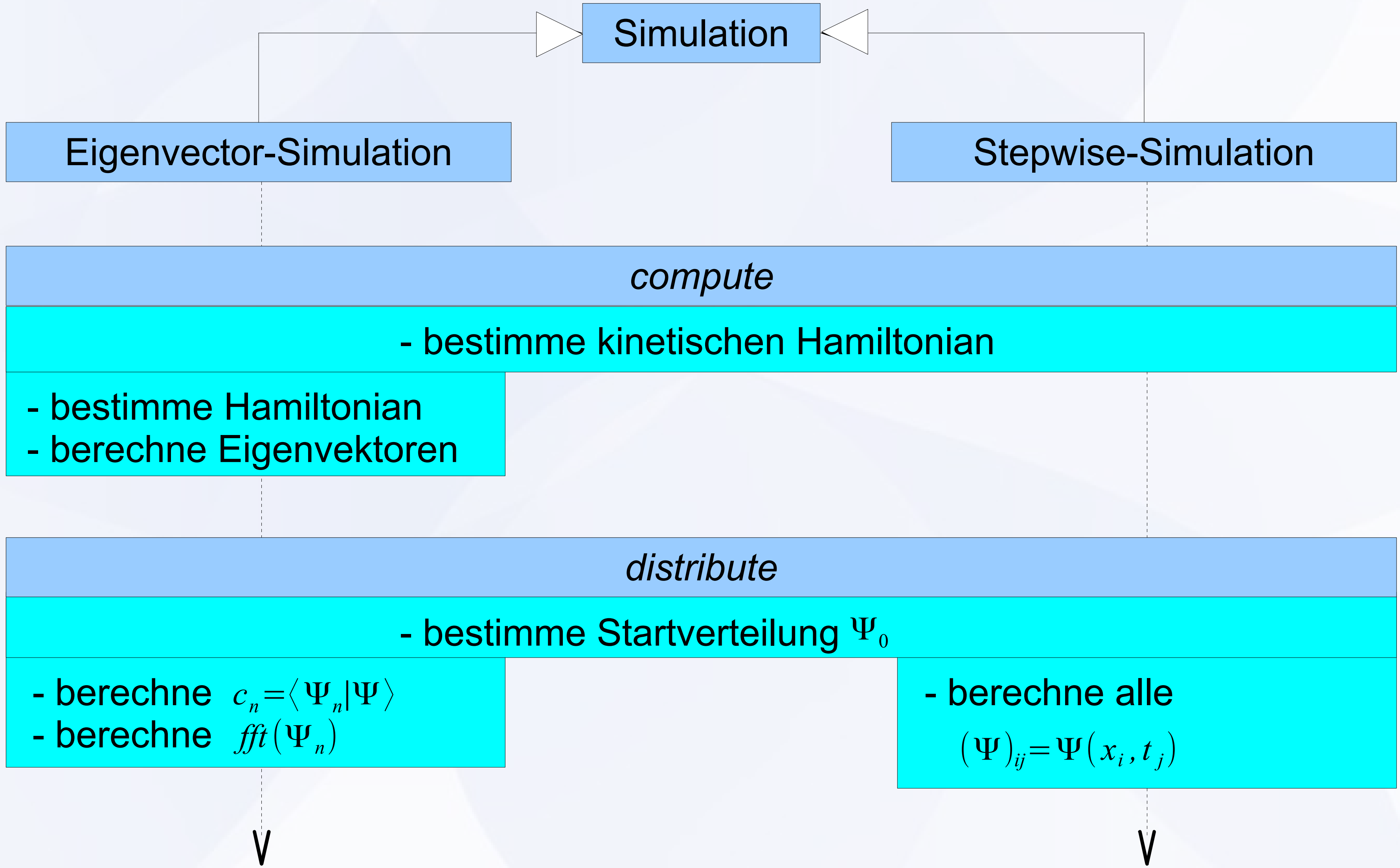
- Numerische Zeitentwicklung von Ψ

$$i\hbar \frac{d\Psi(x,t)}{dt} = H(t)\Psi(x,t)$$

- Crank-Nicholson-Operator

$$\Psi(x,t+\Delta t) = \frac{1_N + \frac{i}{\hbar} H(x,t)}{1_N - \frac{i}{\hbar} H(x,t)} \Psi(x,t)$$

Programmstruktur



Programmstruktur

Eigenvector-Simulation

Stepwise-Simulation

plot

- bestimme t aus Position des Schiebereglers

- berechne

$$\Psi(x,t)=\sum_n c_n \mathrm{e}^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \Psi_n(x,t=0)$$

- im k-Raum analog
- plotte

$$\Psi(x,t)\ ,\ V(x)\ ,\ \Psi_k(x,t)$$

- diskretisiere t = t_j
- plotte

$$(\Psi)_{\cdot,j}=\Psi(x,t_j)$$
$$(V)_{\cdot,j}=V(x,t_j)$$
$$\mathit{fft}((\Psi)_{\cdot,j})$$

Live-Demo

… → MATLAB