1. Übungseinheit vom 10.04.2018

1 Rekursion 1: Sphärische Neumannfunktionen

In der dieser Übungseinheit wurde ein Programm zur Berechnung der sphärischen Neumannfunktionen $n_l(\rho)$ mithilfe der Rekursionsbeziehung

$$n_{l+1}(\rho) + n_{l-1} = \frac{2l+1}{\rho} n_l(\rho) \tag{1}$$

und den Startfunktionen für $l = 0$ und $l = 1$

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho} \tag{2}$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\sin\rho}{\rho} - \frac{\cos\rho}{\rho^2} \tag{3}$$

erstellt.
Das fortran script *recursion/recursion1.f95* implementiert diese Funktionalität.

2 Rekursion 2: Binominalkoeffizienten

Zudem wurde ein Programm zur Berechnung des Binominalkoeffizienten $\binom{n}{k}$ erstellt.
Das fortran script *recursion/recursion2.f95* implementiert diese Funktionalität.

3 Propagation eines Wellenpaketes

Im Rahmen der Einheit soll ebenfalls die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \left|\psi(x,t)\right\rangle = \hat{H} \left|\psi(x,t)\right\rangle \tag{4}$$

mit dem Hamiltonoperator im Ortsraum $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta + V(x)$ (Δ ist der Laplace Operator) in natürlichen Einheitn ($e = m_e = \hbar = 1$) durch Zeitpropagation für ein zum Zeitpunkt $t = 0$ Gaussförmiges Wellenpaket

$$\left|\psi(x,t)\right\rangle \propto \frac{1}{1+it} e^{-\frac{(x-k_0 t)^2}{2(1+it)}} e^{i(k_0 x - k_0^2/2)} \tag{5}$$

mit Startimpuls $p(t = 0) = 0$ (d.h. Startwellenvektor $k(t = 0) = k_0 = 0$) gelöst werden.
Die Propagation des Wellenpaketes soll einmal ohne äußeres Potetnial (d.h. $V(x) = 0$) und einmal mit einem Yukawa Potential (in natürlichen Einheiten)

$$V_{Yuk}(x) = \frac{e^{-3|x|}}{1 + |x|} \tag{6}$$

berechnet werden.
Das fortran script *propagate/propagate.f95* implementiert diese Funktionalität durch Anwendung des Zeitpropagators in Ortsdarstellung (die tridiagonalen Matrizen H und $H*$), d.h. man erhält die Rekursionsgleichung

$$H^* |\psi(x, t_{new}) = H |\psi(x, t_{old})\rangle\rangle \tag{7}$$

womit die Zeitentwicklung $|\psi(x, t)\rangle$ berechnet werden kann.
Das bash script *propagate/plotter.sh* verwendet den Output von propagte.f95 um ein GnuPlot .gif vom Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi(x, t)|^2$ (d.h. der Wahrscheinlihckeitsdichte des Teilchenortes) zu erstellen.
Die Gifs *propagaten/propagationFreeParticle.gif* und *propagate/propagationYukawaPotential.gif* zeigen die Propagation ohne und mit V_{Yuk}, für eine Ortsauflösung von $dx = 0.1$ und einen Zeitschritt $dt = t_{new} - t_{old} = 0.01$.
Aufgrund unpassender Randbedingungen kommt es nach längerer Propagation zu numerischen Instabilitäten die die Simulation zerschiessen.