

3. Übungseinheit vom 24.04.2018

1 Laplace Gleichung

Das script *laplace/laplace.f95* löst die Laplacegleichung

$$\Delta V(x, y) = 0 \quad (1)$$

für das elektrische Potential $V(x, y)$ einer 15cm x 15cm großen leitenden Platte (mit Erdnung am Rand) bei der in der Mitte ein 5cm x 5cm großes Feld auf einer Spannung von 1000V gehalten wird. Das bash script *plotLaplace.sh* verwendet GnuPlot zum darstellen des Potentials als Heatmap.

2 Propagation eines Wellenpaketes

Im Rahmen der Einheit soll ebenfalls die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar |\psi(x, t)\rangle = \hat{H} |\psi(x, t)\rangle \quad (2)$$

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

$$|\psi(x, t)\rangle \propto \frac{1}{1+it} e^{-\frac{(x-k_0 t)^2}{2(1+it)}} e^{i(k_0 x - k_0^2/2)} \quad (3)$$

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 Potential (d.h. $V(x) = 0$) und einmal mit einem Yukawa Potential (in natürlichen Einheiten)

$$V_{Yuk}(x) = \frac{e^{-3|x|}}{1+|x|} \quad (4)$$

berechnet werden.

Das fortran script *propagate/propagate.f95* implementiert diese Funktionalität durch Aufspaltung des Operators zur Zeitpropagation in einen ortsabhängigen Teil (mit $V(x)$) und einen impulsabhängigen Teil (mit $T(k) = (\hbar k)^2$)

$$e^{-iH\Delta t} \approx e^{-iT\frac{\Delta t}{2}} e^{-iV\Delta t} e^{-iT\frac{\Delta t}{2}} + O(\Delta t^3) \quad (5)$$

Im Ortsraum ist der Anteil $e^{-iV\Delta t}$ diagonal, im Impulsraum der Anteil $e^{-iT\frac{\Delta^2}{2}}$, d.h. durch Fouriertransformation und Rücktransformation von $|\psi\rangle$ kann der jeweilige Operator einfach als Multiplikation mit einem Skalar auf die Wellenfunktion ausgeführt werden.

Das bash script *propagate/plotter.sh* verwendet den Output von *propagate.f95* um ein GnuPlot .gif vom Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi(x, t)|^2$ (d.h. der Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchenortes) zu erstellen.

Die Gifs *propagate/propagationFreeParticle.gif* und *propagate/propagationYukawaPotential.gif* zeigen die Propagation ohne und mit V_{Yuk} , für eine Ortsauflösung von $dx = 0.05$ und einen Zeitschritt $dt = t_{new} - t_{old} = 0.01$.

Aufgrund unpassender Randbedingungen kommt es nach längerer Propagation zu numerischen Instabilitäten die die Simulation zerschliessen.

NOTE: Das script *propagate/propagate.f95* verwendet die CERNLIB Subroutine **cfstft** (complex fast fourier transformation).