Dr. Wolfgang Niedenzu
Prof. Dr. Helmut Ritsch

Aufgabe 3: **Zeitabhängige Schrödingergleichung: Teilchen im unendlich tiefen Kastenpotential**

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{1}$$

mit dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \geq L/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{2}$$

für $V_0 > 0$. Im Folgenden betrachten wir den Grenzfall $V_0 \to \infty$. Die folgenden Aufgaben sollen zunächst **ohne** Zuhilfenahme der QuantumOptics-Toolbox implementiert werden.

1. Berechnen Sie mit drei verschiedenen Methoden die durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \tag{3}$$

mit dem Hamiltonoperator (1) bestimmte Zeitentwicklung für einen Anfangszustand $|\psi_0\rangle$.

a) Exakter Zeitentwicklungsoperator: Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren ist die Lösung der Schrödingergleichung (3) durch

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|\psi_0\rangle \tag{4}$$

gegeben (siehe Vorlesung).

b) Die Matrix-Exponentialfunktion in Glg. (4) ist für große Systeme numerisch aufwendig zu berechnen. Wir verwenden daher die Tatsache, dass der Hamiltonoperator aus zwei Teilen (kinetische und potentielle Energie) besteht. Für kleine Zeiten Δt lässt sich der Zeitentwicklungsoperator näherungsweise als

$$\exp\left(-i\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) \approx \exp\left(-i\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{V(x)\Delta t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \tag{5}$$

darstellen. Der dabei auftretende Fehler ist von der Ordnung Δt^3, wie sich aus der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel $e^A e^B = e^C$ mit

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] - \frac{1}{12}[B, [A, B]] + \dots \tag{6}$$

ergibt. Damit lässt sich der Zeitentwicklungsoperator in Gleichung (4) für $t = M\Delta t$ näherungsweise als

$$\begin{aligned} \exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right) &= \prod_{n=1}^{M} \exp\left(-i\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) \\ &\approx \exp\left(-i\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)\left[\prod_{n=1}^{M} \exp\left(-i\frac{V(x)\Delta t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\right] \exp\left(i\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \end{aligned} \tag{7}$$

darstellen. Beachte, dass wegen $M\Delta t^3 = t\Delta t^2$ der Fehler nach M-facher Multiplikation nur mehr zweiter Ordnung in Δt ist.

Nun wird ausgenützt, dass die kinetische Energie im Impulsraum und die potentielle Energie im Ortsraum jeweils diagonal sind. Die Orts- und Impulsbasis sind über die Fouriertransformation verknüpft,

$$\psi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} \mathrm{d}x. \tag{8}$$

Für 2^N Punkte lässt sich die diskrete Fouriertransormation (DFT) numerisch effizient mit der *fast Fourier transform* (Funktionen `fft` und `ifft`; darüber hinaus werden die Funktionen `fftshift` und `ifftshift` benötigt) berechnen.

c) Numerisches Lösen der Differentialgleichung (adaptiver Zeitschritt).

2. Überprüfen Sie, dass die Zeitentwicklung unitär ist.

3. Interpretieren Sie $|\psi(t)\rangle$ wenn Sie (i) in einem Eigenzustand von H starten und (ii) in einer Superposition von Eigenzuständen starten. Worin unterscheidet sich die Dynamik?

4. Setzen Sie als Anfangsbedingung eine koheränte Superposition der ersten zwei Eigenzustände an und veranschaulichen Sie sich die Zeitentwicklung der Koeffizienten $\langle\psi_n|\psi(t)\rangle$. Wie interpretieren Sie das Ergebnis?

5. Implementieren Sie die obigen Aufgaben mit Hilfe der QuantumOptics.jl-Toolbox (Dokumentation: `https://qojulia.org/documentation/`).

   Hinweis: Verwenden Sie die Funktionen `transform`, `LazySum`, `LazyProduct` und `timeevolution.schroedinger`.