Dr. Wolfgang Niedenzu
Prof. Dr. Helmut Ritsch

Aufgabe 2: **Stationäre Schrödingergleichung: Teilchen im unendlich tiefen Kastenpotential**

Gegeben sei das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \leq L/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{1}$$

für $V_0 > 0$. Im Folgenden betrachten wir den Grenzfall $V_0 \to \infty$.

1. Implementieren Sie den Hamiltonoperator

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

   in Julia (Dokumentation: `https://docs.julialang.org`).

   Hinweise:

   - Führen Sie mit Hilfe einer geeigneten Energieskala den Hamiltonoperator in eine dimensionslose Form über.
   - Die einfachste Diskretisierung der zweiten Ableitung ist

     $$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{\Delta x^2}. \tag{3}$$

     Die Koeffizienten für höhere Ordnungen lauten $(-5/2, 4/3, -1/12)$ für $(x_i, x_{i\pm1}, x_{i\pm2})$ und $(-49/18, 3/2, -3/20, 1/90)$ für $(x_i, x_{i\pm1}, x_{i\pm2}, x_{i\pm3})$.

2. Überprüfen Sie numerisch, dass der Hamiltonoperator (2) hermitesch ist.

3. Berechnen Sie mit Hilfe der Funktion `eigen` das Spektrum $\{E_n\}$ und die Eigenvektoren $\{|\psi_n\rangle\}$ des Hamiltonoperators (2) für $V_0 \to \infty$.

   Zeigen Sie:

   a) Die Eigenvektoren $|\psi_n\rangle$ sind normiert.

   b) Die stationäre Schrödingergleichung

   $$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \tag{4}$$

   ist erfüllt.

c) Die Matrix $\{|\psi_n\rangle\}_n$ diagonalisiert den Hamiltonoperator, d. h.

$$H = \sum_n E_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \,. \tag{5}$$

d) Die Energieeigenwerte erfüllen die aus der Vorlesung bekannte Relation

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \quad (n \in \mathbb{N}). \tag{6}$$

Untersuchen Sie den Einfluss von Potentialtiefe und Ortsauflösung.

e) Die Eigenfunktionen sind

$$\psi_n(x) \propto \begin{cases} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & |x| \leq L/2 \text{ und } n \text{ gerade} \\ \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & |x| \leq L/2 \text{ und } n \text{ ungerade}\,. \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{7}$$

4. Vergleichen Sie die Eigenenergien und Eigenzustände für $V_0 \to \infty$ und endlicher Potentialtiefe V_0.

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

   Hinweis: Verwenden Sie die Funktionen `PositionBasis`, `MomentumBasis`, `position`, `momentum`, `potentialoperator` und `eigenstates`.