INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. U. Motschmann
Dipl.-Phys. T. Bagdonat

QUANTENMECHANIK — WS 2000/2001

6. Übungsblatt — Abgabe: Freitag, 1.12.2000, bis 9^{45} Uhr

Sprechstunde: T. Bagdonat, A317, Dienstag ab 14^{00} Uhr, Tel.: 391-5187
Ein Link zu dieser Vorlesung: `http://www.tu-bs.de/institute/theophys/edu.html`

11. **Numerische Lösung der stationären SGL**

Es soll ein kleines Programm erstellt werden, daß Lösungen für gebundene Zustände der eindimensionalen, stationären Schrödingergleichung findet, und dieses für ein Teilchen im endlichen Potentialkasten angewendet werden. Es gibt natürlich sehr viele mögliche Algorithmen, um dies zu tun, und es darf selbstverständlich jeder davon verwendet werden. Eine einfache Methode ist die folgende:

(a) Durch Umskalieren der x-Achse kann man es erreichen, daß der Vorfaktor $\hbar^2/2m$ in der stationären SGL verschwindet. Diese lautet dann in einer Dimension:

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = (V(x) - U)\,\Psi(x) \quad .$$

Diese Differentialgleichung ist numerisch zu lösen, wobei Ψ hier reell ist. Das kontinuierliche $\Psi(x)$ wird numerisch durch endlich viele Werte an den N äquidistanten Stützstellen $x_j, j = 0, \ldots, N-1$ repräsentiert: $\Psi_j = \Psi(x_j)$. Zeigen Sie, daß dann die 2. Ableitung folgendermaßen diskretisiert werden kann:

$$\Psi''_j = \frac{\Psi_{j-1} - 2\Psi_j + \Psi_{j+1}}{\Delta x^2} \qquad , \quad \Delta x = x_j - x_{j-1} \quad .$$

(b) Mit obigem Ausdruck erhält man aus der SGL eine Bestimmungsgleichung $\Psi_{j+1} = f(\Psi_j, \Psi_{j-1})$. Stellen Sie diese auf.

(c) Zum Lösen der SGL braucht man also mindestens zwei Randwerte Ψ_0 und Ψ_1. Daraus kann man iterativ alle Ψ_j bestimmen. Ψ_0 ist zunächst beliebig (Die Lösungen sind alle bis auf eine Konstante bestimmt). Der linke Rand (also x_0) liegt hinreichend weit weg vom Potentialtopf. In diesem Bereich hat Ψ also einen exponentiellen Verlauf. Bestimmen Sie unter dieser Annahme Ψ_1 aus Ψ_0.

(d) Für $V(x)$ schreibe man sich erst einmal ein Unterprogramm. Als Beispiel eignet sich ein Potentialkasten der Breite 10 und Höhe 2 symmetrisch um $x = 0$ (s. Bild auf der Rückseite).

Desweiteren schreibe man ein Programm, dem man lediglich den Parameter U übergibt und das die oben aufgeführte iterative Bestimmung der Ψ_j vornimmt. Sinnvoll sind hier etwa 1000 Stützstellen (es geht auch mit weniger, je nach Rechnerleistung), wobei der Integrationsbereich für x etwa zwischen $x_l = -10$ und $x_r = 10$ liegen sollte.

Das Programm teste man nun, indem man einen erratenen Wert für U – der in etwa der Grundzustandsenergie entspricht – übergibt, und das Programm das zugehörige Ψ bestimmen läßt. Das Ergebnis läßt man sich irgendwie grafisch ausgeben. Für ein beliebiges U erhält man i.a. Lösungen, die am rechten Rand nicht asymptotisch gegen null gehen, wie es sein soll. Durch Probieren versuche man einen möglichst genauen Wert für U zu finden, der dieses Kriterium „optisch" gut erfüllt. Man hat so „von Hand" einen Energieeigenwert gefunden.

(e) Will man die Suche nach den Eigenwerten automatisieren, so braucht man ein quantitatives Kriterium für „asymptotisch gegen null gehen". Zeigen Sie, daß

$$\Gamma(U) = 0 \quad , \quad \text{mit} \quad \Gamma(U) = \sqrt{V(x_r) - U} \cdot \Psi(x_r) + \Psi'(x_r)$$

ein solches Kriterium darstellt.

(f) Erweitern Sie nun ihr Programm derart, daß es (z.B. durch Intervallschachtelung) die Nullstellen von $\Gamma(U)$ und damit die Energieeigenwerte U_n automatisch sucht. $\Gamma(U)$ wird natürlich numerisch nie genau null, es reicht zu prüfen, ob z.B. bei der Intervallschachtelung die Intervallbreite eine gewisse Schranke unterschreitet.

(g) Auf dieser Weise bestimme man alle Energieeigenwerte für den oben beschrieben Potentialkasten. Weiterhin soll auch die jeweilige Lösung von Ψ grafisch dargestellt werden. Dazu ist es sinnvoll Ψ zu normieren. Dazu erweitere man das Programm so, daß es für die Lösungen erhaltenen Lösungen das Integral von Ψ^2 berechnet.

Die normierten Eigenfunktionen und Energieeigenwerte gebe man dann noch irgendwie grafisch aus. Das Endergebnis könnte z.B. so aussehen, wie unten gezeigt. Wer Lust hat, kann dann natürlich noch viele verschiedene andere $V(x)$ vorgeben und lösen. Viel Spaß dabei!