

Einführung in die Quantentheorie

Hausübung, Blatt 7

SoSe 2024

Abgabe: 30.05.2024

Computerübungen

Betreuer: Anas Abdelwahab

Es gelten die Bemerkungen, die auf dem Blatt der ersten Computerübung stehen. Wieder gilt hier in den Aufgaben $\hbar = 1 = c$ und $m = 1$.

[H18] Shooting-Methode am Potentialtopf

(10 Punkte)

Stationäre Zustände (Energie E) eines Partikels der Masse m in einem Potential V in einer Dimension werden durch Wellenfunktionen beschrieben, welche der Schrödingergleichung

$$-\frac{1}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

genügen. Eine solche Differentialgleichung hat Lösungen für jeden Wert von E , aber nur für bestimmte Werte von E sind diese normierbar. In dieser Übung soll der diskrete Teil des Spektrums numerisch untersucht werden.

(a) Pöschl-Teller-Potential

Für diesen Teil sei das Potential gegeben durch

$$V(x) = -\frac{6}{\cosh^2 x}. \quad (2)$$

Beachten Sie, dass es symmetrisch ist unter $x \rightarrow -x$. Dies bedeutet, dass die Eigenfunktionen entweder gerade, $\psi(-x) = \psi(x)$, oder ungerade, $\psi(-x) = -\psi(x)$, sind. Um nach geraden Eigenfunktionen zu suchen, können Sie $\psi(0) = 1$ und $\psi'(0) = 0$ einstellen. Um nach ungeraden Eigenfunktionen zu suchen, stellen Sie $\psi(0) = 0$ und $\psi'(0) = 1$ ein. Mit diesen Cauchy-Daten lösen Sie numerisch die Schrödingergleichung (1) mit (2), um das diskrete Spektrum zu bestimmen. Zeichnen Sie die entsprechenden Wellenfunktionen auf. Einige Bemerkungen:

1. Weil (1) reell ist, können Sie $\psi(x)$ als reell annehmen. Denken Sie daran, dass die Grundzustandswellenfunktion keine Nullstellen hat.
2. Für „falsche“ Werte von E wird die Wellenfunktion für große $|x|$ exponentiell wachsen.

(b) Ein kompakter Potentialtopf

Für diesen Teil sei das Potential gegeben durch

$$V(x) = \begin{cases} -14.5(1-x+13x^2+11x^3)(1-x)^2(1+x)^2 & \text{für } |x| < 1 \\ 0 & \text{für } |x| > 1 \end{cases}. \quad (3)$$

Im Bereich $|x| > 1$ ist das Teilchen frei und demnach $\psi(x) \propto \exp(\pm\sqrt{-2E}x)$. Als Folge muss für eine normierbare Lösung von (1) gelten, dass $\psi'(-1) = \sqrt{-2E}\psi(-1)$ und $\psi'(1) = -\sqrt{-2E}\psi(1)$. Das Cauchy-Problem ist überdeterminiert und hat nur Lösungen für spezielle Werte von E . Ermitteln Sie das diskrete Spektrum durch numerisches Lösen der Schrödingergleichung (1) mit (3) für $x \in [-1, 1]$. Suchen Sie dafür nach solchen Werten von E , die beide Randbedingungen zulassen. Zeichnen Sie die Wellenfunktionen des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands auf. Vergleichen Sie die Zeichnungen mit der Form des Potentials.