Einführung in die Quantentheorie

Hausübung, Blatt 7 | **SoSe 2015** | **Abgabe: 18.06.2015**

Computerübungen

Betreuer: Leander Fiedler

Falls Sie Fragen zu den Aufgaben oder Probleme mit Mathematica haben können Sie mich per Mail erreichen (`leander.fiedler@itp.uni-hannover.de`) oder am Mittwoch, den 10.06.2015, in meinem Büro zwischen 14 und 16 Uhr. Ansonsten gelten die Bemerkungen, die auf dem Blatt der vorherigen Computerübung stehen. Wieder gilt hier in den Aufgaben $\hbar = 1 = c$ und $m = \frac{1}{2}$.

[H18] Shooting Method am Potentialtopf (10 Punkte)

Bestimmen Sie numerisch die Eigenwerte des Hamiltonoperators

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

mit dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} -29(1 - x + 13x^2 + 11x^3)(1-x)^2(1+x)^2 & , |x| < 1 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} . \tag{2}$$

Aus einer halbklassischen Analyse findet man, dass die Energieeigenwerte E des gegebenen Hamiltonoperators (1) sich im Intervall $[V_{min}, 0]$ befinden, wobei V_{min} das globale Minimum des Potentials V ist. Die stationäre Schrödingergleichung lautet in diesem Fall

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3}$$

und lässt sich umschreiben als Differentialgleichung erster Ordnung für zwei Funktionen $\psi_1 = \psi$ und $\psi_2 = \psi'$:

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} . \tag{4}$$

Aus der Lösungstheorie solcher Differentialgleichungen folgt, dass zu jedem Anfangswert $(\psi(x_0), \psi'(x_0))$ genau eine Lösung in einer Umgebung von x_0 existiert und man so die Lösungen an jeder beliebigen Stelle parametrisieren kann. Das bedeutet auch, dass der Lösungsraum 2-dimensional ist und es immer zwei linear unabhängige Lösungen gibt. Weiterhin können die Lösungen immer als reell angesetzt werden, da die Koeffizenten in der Schrödingergleichung ebenfalls reell sind. Zudem sind die Eigenwerte nicht entartet.

Die Schrödingergleichung (3) gehört zu der Art von 1-dimensionalen Problemen, welche in der Mathematik als Sturm-Liouville-Probleme bekannt sind. In diesem Fall gibt es einen einfachen Weg die Eigenwerte numerisch zu berechnen. Dazu führt man das System (4) von linearen Differentialgleichungen erster Ordnung auf eine Differentialgleichung erster Ordnung für eine Funktion zurück, die nun nicht mehr linear ist, aber dennoch eindeutige Lösungen besitzt.

Dazu geht man folgendermaßen vor. Außerhalb des Potentials, also hier bei $x < x_{min} = -1$ und $x > x_{max} = 1$ ist die Lösung der Schrödingergleichung bekannt, nämlich $\psi(x) = \exp(\pm\lambda x)$, wobei $\lambda = \sqrt{-2mE}/\hbar$ und das Vorzeichen im Exponenten immer so gewählt ist, dass ψ normierbar ist. Der Startwert für das numerische Lösungsverfahren auf der linken Seite ist also $(\psi(x_{min}), \psi'(x_{min})) \propto (1, \lambda)$. Eigenfunktionen zum Eigenwert E erfüllen nun die Anschlussbedingung auch auf der rechten Seite, nämlich $(\psi(x_{max}), \psi'(x_{max})) \propto (1, -\lambda)$. Das heßt, man löst für verschiedene Energien E die entsprechende Differentialgleichung mit dem Startwert bei x_{min} und prüft dann, ob auf der rechten Seite die

Anschlussbedingung erfüllt ist. Ist dies der Fall, hat man einen Eigenwert des Hamiltonoperators (1) gefunden.

Da nun der Lösungsraum für $(\psi(x), \psi'(x))$ der Differentialgleichung (4) zweidimensional und reell ist, ist die interessante Größe das Verhältnis zwischen ψ und ψ', oder anders ausgedrückt, der Winkel zwischen den beiden. Also benutzt den Ansatz

$$\psi(x) = r(x)\sin(\theta(x)), \quad \psi'(x) = r(x)\cos(\theta(x)) \tag{5}$$

und gelangt damit zur folgender Differentialgleichung für θ.

$$\theta'(x) = 1 + \left(\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) - 1\right)\sin^2(\theta(x)). \tag{6}$$

Für jede Lösung θ von (6) ist nun $\theta + \pi$ ebenfalls eine Lösung. Der Trick besteht nun, diese nicht als gleiche Lösung zu betrachten, sondern genau die Windungszahl n von θ zu zählen. Die Anschlussbedingung lauten dementsprechend

$$\theta(x_{min}) = \operatorname{arccot}\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\right) \in [0, \frac{\pi}{2}] \tag{7}$$

$$\theta(x_{max}) = \operatorname{arccot}\left(\frac{-\sqrt{-2mE}}{\hbar}\right) \in [(n + \frac{1}{2})\pi, (n+1)\pi]. \tag{8}$$

Wenn man das Verhalten der Lösungen θ und der Anschlussbedingungen analysiert stellt man fest, dass die Windungszahl n von θ genau die Anzahl Nullstellen von ψ sind und die Lösungen ψ parametrisieren. Weiterhin sind die Lösungen θ für die verschiedenen Energien eindeutig bestimmt, es gibt also keine Schnittpunkte zwischen verschiedenen Lösungen. Zum Finden der Eigenwerte des Hamiltonoperators (1) löst man also die Differentialgleichung (6) für verschiedene Energien E mit der Startbedingung (7) bei x_{min} und findet die Lösungen, die bei x_{max} die Anschlussbedingung (8) erfüllen.

Nun zur Aufgabe. Im StudIP finden Sie ein Mathematica-Notebook mit einem vorgefertigten explizitem Runge-Kutta Verfahren 4-ter Ordnung und weiterer Code, der für die Lösung der Aufgabe verwendet werden darf.

(1) Plotten Sie die Funktion $V(x)$ und schätzen Sie mit `NIntegrate` die Anzahl der Eigenzustände (gebundene Zustände) mit der halbklassischen Abschätzung

$$(\#\text{Eigenzustände mit Energie} \leq E) \approx \frac{\sqrt{2m}}{\hbar\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\, \sqrt{E - V(q)}\,\Theta(E - V(q))$$

ab, wobei Θ die Heavisidesche Stufenfunktion ist.

(2) Lösen Sie die Differentialgleichung (6) mit der Anfangsbedingung $\theta(-1) = \operatorname{arccot}(\sqrt{-E})$ und der Anschlussbedingung $\theta(1) = \operatorname{arccot}(-\sqrt{-E})$ mithilfe des expliziten Runge-Kutta Verfahren 4-ter Ordnung. Überprüfen Sie dabei die Abhängigkeit von $\theta(1)$ von der gewählten Schrittweite.

(3) Finden Sie die Werte E, bei der die Anschlussbedingungen erfüllt sind. Stellen Sie sicher, dass die Schrittweite in (3) klein genug gewählt wurde um ein verlässliches Ergebnis zu erhalten. Versuchen Sie dabei die ersten 4 signifikanten Stellen korrekt zu finden.

(4) Lösen Sie auf dem Intervall $[-4, 4]$ die Schrödingergleichung (4) für die in Teilaufgabe (4) gefundenen Energiewerte und mit den entsprechenden Anfangsbedingen bei $x = -4$ für ψ und ψ'. Verwenden Sie dafür das Runge-Kutte Verfahren für die Differentialgleichung, die man für (ψ, ψ') aus der Schrödingergleichung erhält. Stellen Sie sicher, dass die Lösung bei $x = 4$ die richtigen Werte annimmt. Plotten Sie das Betragsquadrat der Lösungen.

(5) Plotten Sie $\psi_0 \pm \psi_1$ mit ψ_0 der Grundzustand und ψ_1 den ersten angeregten Zustand. Wo sind diese lokalisiert?