Einführung in die Quantentheorie

Hausübung, Blatt 7 | **SoSe 2018** | **Abgabe: 05.06.2015**

Computerübungen

Betreuer: Gleb Zhilin

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 Punktteilchens der Masse m in einem Potential V in einer Dimension werden durch Wellenfunktionen beschrieben, welche der Schrödingergleichung

$$-\tfrac{1}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\,\psi(x) \;=\; E\,\psi(x) \tag{1}$$

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

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

Beachten Sie, dass es symmetrisch ist unter $x \to -x$. 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

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

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.

Sie könnten die Mathematica-Befehle `NDSolve` und `NDSolveValue` nützlich finden.