Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2017

Blatt 6: Abgabetermin: Dienstag, der 13.06.2017, 12:00

Aufgabe 1: Ebene Bewegung mit Zentralkraft – Euler-Verfahren

(11 Punkte)

In Aufgabe 1 von Blatt 5 wurde gezeigt, dass die Bewegungsgleichungen für die ebene Bewegung mit Zentralkraft auf die Form

$$\frac{\mathrm{d}\vec{u}}{\mathrm{d}t} + \vec{f}(\vec{u}, t) = 0 \tag{1}$$

gebracht werden können.

a) Schreiben Sie ein Programm, welches die gekoppelten Differentialgleichungen (1) mit Hilfe des Euler-Verfahrens löst. Das Potential sei zunächst $V(r) = -1/r$, (Masse $m = 1$). (3 Punkte)

b) Stellen Sie die Lösung der Differentialgleichungen als Bahn in der x-y-Ebene dar. Finden Sie geeignete Anfangswerte, so dass sich die aus dem Keplerproblem bekannte Ellipse für die Bahnbewegung ergibt. (3 Punkte)

c) Erstellen Sie ein Diagramm, in dem für die Bahn aus Teilaufgabe b) die Zeitabhängigkeit der kinetischen Energie $T(t)$, der potentiellen Energie $V(t)$ und der Gesamtenergie $E(t) = T(t) + V(t)$ dargestellt ist. (2 Punkte)

d) Eine Störung des $1/r$-Potentials der Form

$$V(r) \rightarrow V'(r) = -\frac{1}{r} + \alpha\frac{1}{r^3}$$

führt zur sogenannten Periheldrehung (Perihel = der sonnennächste Punkt einer Umlaufbahn um die Sonne). Erweitern Sie das Programm aus den Teilaufgaben a) und b) entsprechend und wählen Sie den Parameter α so, dass sich eine deutlich sichtbare Periheldrehung ergibt. (3 Punkte)

Aufgabe 2: eindimensionaler Potentialtopf

(11 Punkte)

Die stationäre Schrödingergleichung in $d = 1$ lautet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \ .$$

Es werden Potentiale der Form

$$V(x) = \begin{cases} f(x) & : \quad 0 < x < L \\ \infty & : \quad \text{sonst} \end{cases}$$

betrachtet, das Teilchen befindet sich also in einem unendlich hohen Potentialtopf mit einem zusätzlichen Potential $f(x)$ für $0 < x < L$.

a) Stellen Sie die Schrödingergleichung mit Hilfe der Substitution $u_1(x) = \psi(x)$, $u_2(x) = \psi'(x)$ in folgender Form dar:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\vec{u}(x) = \vec{g}(\vec{u}, x) \ .$$

(2 Punkte)

Im folgenden werden $L = 1$, $\hbar = 1$, $m = 1$ und die Schrittweite $\Delta x = 10^{-3}$ gesetzt. Das Potential innerhalb des Potentialtopfs ist von der Form

$$f(x) = ax \ , \quad a \geq 0 \ .$$

Die Randbedingungen bei $x = 0$ sind: $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$.

b) Berechnen Sie mit Hilfe des Euler-Verfahrens den Wert der Wellenfunktion am Ort $x = L$, $g(\varepsilon) = \psi_\varepsilon(L)$, für $0.2 \leq \varepsilon \leq 20$. Dabei ist die dimensionslose Größe ε definiert als:

$$\varepsilon = E\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2} \ . \tag{2}$$

Erstellen Sie zunächst für $a = 0$ ein Diagramm für die Funktion $g(\varepsilon)$. Für die exakte Lösung liegen die Nullstellen von $g(\varepsilon)$ bei $\varepsilon_n = n^2$, $n = 1, 2, \ldots$ Aus den Nullstellen ε_n ergeben sich die Eigenenergien E_n über Gl. (2). (4 Punkte)

c) Jetzt wird $a = 0, 10, 20, \ldots, 60$ gesetzt. Stellen Sie die entsprechenden Funktionen $g(\varepsilon)$ in einem Diagramm dar. (2 Punkte)

d) Berechnen Sie für $a = 0$ und $a = 50$ jeweils die ersten vier Eigenfunktionen, also die Wellenfunktionen $\psi_n(x)$, $(n = 1, \ldots, 4)$ mit den niedrigsten Eigenenergien E_n. Hinweis: Eine Nullstellensuche für die Funktion $g(\varepsilon)$ mit dem Bisektions-Verfahren erhöht zwar die Genauigkeit, ist hier aber nicht notwendig. Erhöhen Sie den Parameter ε schrittweise um $\Delta\varepsilon = 0.01$ und betrachten Sie die ε-Werte, bei denen $g(\varepsilon)$ das Vorzeichen wechselt. (3 Punkte)