

## Computerphysik

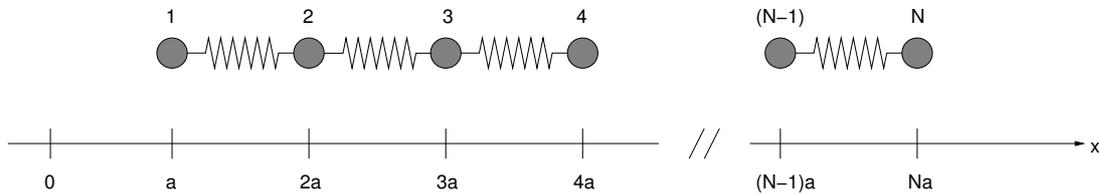
apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2017

**Blatt 9:** Abgabetermin: Dienstag, der 04.07.2017, 12:00

### Aufgabe 1: harmonische Kette – numerische Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen

(8 Punkte)



Betrachten Sie das in der Abbildung dargestellte System aus  $N$  Körpern mit Massen  $m_n$ , die über Federn untereinander (mit Federkonstanten  $k$ ) verbunden sind (offene Randbedingungen an beiden Enden der Kette). Die Ruhelagen der Körper sind gegeben durch  $x_{n,0} = na$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ) und die Auslenkungen aus den Ruhelagen durch  $\xi_n = x_n - x_{n,0}$ .

- Wie lauten die Newtonschen Bewegungsgleichungen für die Auslenkungen  $\xi_n(t)$ ? (2 Punkte)
- Schreiben Sie die gekoppelten Differentialgleichungen aus Teilaufgabe a) in der Form

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}(\vec{u}) . \quad (1)$$

(2 Punkte)

- Schreiben Sie ein Programm, welches die gekoppelten Differentialgleichungen (1) mit Hilfe des Euler-Verfahrens löst. Setzen Sie die Massen  $m_i = m = 1$  ( $i = 1, \dots, N$ ) sowie  $k = 1$ ,  $a = 1$ . Betrachten Sie die folgenden Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned} \xi_1(0) &= 1 , \\ \xi_i(0) &= 0 , \quad (i = 2, \dots, N) , \\ \dot{\xi}_i(0) &= 0 , \quad (i = 1, \dots, N) . \end{aligned}$$

Die Zahl der Massenpunkte sei  $N = 50$  und der Zeitschritt für das Euler-Verfahren  $\Delta t = 0.01$ . Erstellen Sie einen Plot mit den Auslenkungen  $\xi_n(t)$  ( $n = 1, \dots, 4$ ) für das Zeitintervall  $0 \leq t \leq 12$ . (4 Punkte)

## Aufgabe 2: harmonischer Oszillator – Hamiltonmatrix

(10 Punkte)

Der Hamiltonoperator des verschobenen harmonischen Oszillators hat die Form

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) + \theta(a + a^\dagger), \quad (2)$$

das entsprechende Potential lautet  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \theta x \sqrt{2m\omega/\hbar}$ .

- a) Geben Sie das Spektrum der Eigenenergien von  $H$  an. Hinweis: das Spektrum ist bis auf die Verschiebung des Minimums des Potentials gegeben durch das Spektrum des nicht-verschobenen harmonischen Oszillators. (2 Punkte)

Im folgenden werden  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$ , und  $m = 1$  gesetzt.

- b) Schreiben Sie ein Programm, welches die Hamiltonmatrix  $\bar{H}$  mit  $(\bar{H})_{mn} = \langle m|H|n\rangle$ ,  $m, n = 0, 1, \dots, N-1$ , für beliebige  $\theta$  und  $N$  belegt (Struktur der Matrix: siehe Seite 33 im Vorlesungsskript). (2 Punkte)
- c) Erstellen Sie je einen Plot der Eigenwerte  $E_n$  für  $N = 10$  und  $N = 12$  in Abhängigkeit von  $\theta$  ( $0 \leq \theta \leq 2$ ), inklusive der exakten Eigenenergien. Diskutieren Sie die Unterschiede zwischen den Spektren der Eigenwerte in diesen beiden Plots. (3 Punkte)

Aus der Lösung des Eigenwertproblems  $\bar{H}\vec{\varphi}_n = E_n\vec{\varphi}_n$  erhält man die Eigenfunktionen in der Form

$$|\varphi_n\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} |m\rangle \langle m|\varphi_n\rangle, \quad \text{mit } \langle m|\varphi_n\rangle = (\vec{\varphi}_n)_m.$$

Dies entspricht im Ortsraum

$$\varphi_n(x) = \sum_{m=0}^{N-1} \langle m|\varphi_n\rangle \psi_m(x)$$

Dabei sind die  $\psi_m(x)$  die Eigenfunktionen des nicht-verschobenen harmonischen Oszillators, siehe Aufgabe 3 auf Blatt 8.

- d) Stellen Sie den resultierenden Grundzustand  $\varphi_0(x)$  für  $\theta = 1.5$  und  $N = 4, 6, 8, 10$  in einem Diagramm graphisch dar. (3 Punkte)