Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

Blatt 6: Abgabetermin: Montag, der 04.06.2018, 12:00

Aufgabe 1: Ebene Bewegung mit Zentralkraft II

(11 Punkte)

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

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

gebracht werden können.

a) Schreiben Sie ein Programm, welches die gekoppelten Differentialgleichungen (1) mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahrens vierter Ordnung löst. Das Potential sei zunächst $V(r) = -1/r$, die Masse ist $m = 1$ und die Anfangsbedingungen sind gegeben durch:

$$r(0) = 1.0\ , \quad \dot{r}(0) = 0.2\ , \quad \phi(0) = 0.0\ , \quad \dot{\phi}(0) = 1.3\ .$$

Die Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens kann $\Delta t = 0.02$ gesetzt werden. Stellen Sie die Lösung der Differentialgleichungen als Bahn in der x-y-Ebene dar. (6 Punkte)

b) Erweitern Sie das Programm so, dass für die Bahn aus Teilaufgabe a) die Zeitabhängigkeit der kinetischen Energie $T(t)$, der potentiellen Energie $V(t)$ und der Gesamtenergie $E(t) = T(t) + V(t)$ berechnet wird. Erstellen Sie ein entsprechendes Diagramm. (2 Punkte)

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

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

führt zur sogenannten Periheldrehung (Perihel = der sonnennächste Punkt einer Umlaufbahn um die Sonne). Erweitern Sie das Programm aus Teilaufgabe a) 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 für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Potential $V(x)$ 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 $0 < x < L$. Im folgenden werden $L = 1$, $\hbar = 1$ und $m = 1$ gesetzt.

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

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

(2 Punkte)

In dieser Aufgabe wird lediglich der Fall $f(x) = 0$ betrachtet. Die Randbedingungen bei $x = 0$ sind: $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$.

b) Schreiben Sie eine Funktion `psi(epsilon)`, welche die Wellenfunktion $\psi(x)$ im Intervall $[0, L]$ mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahrens vierter Ordnung bestimmt. Die Funktion soll mit `return (xv,psiv)` je ein Feld für die x- und ψ-Werte ausgeben. Die dimensionslose Größe ε definiert als:

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

Hinweis; Verwenden Sie die Notation aus der Vorlesung mit $x_1 = 0$ und $x_N = L$. Setzen Sie $N = 200$. (4 Punkte)

c) Berechnen Sie mit Hilfe der Funktion `psi(epsilon)` aus Teilaufgabe b) den Wert der Wellenfunktion am Ort $x = L$, $g(\varepsilon) = \psi_\varepsilon(L)$, für $0.2 \leq \varepsilon \leq 20$ Erstellen Sie ein Diagramm für die Funktion $g(\varepsilon)$. Für die exakte Lösung liegen die Nullstellen von $g(\varepsilon)$ bei $\varepsilon_n = n^2$, $n = 1, 2, \ldots$. (3 Punkte)

d) Erstellen Sie ein Diagramm mit den numerisch berechneten Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ für $\varepsilon_n = n^2$, $n = 1, 2, \ldots, 5$. (2 Punkte)