Übungsaufgaben zur Vorlesung

# Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

**Blatt 8**: Abgabetermin: Montag, der 18.06.2018, 12:00

## Aufgabe 1: Gauß-Verfahren

(7 Punkte)

Das folgende Programm transformiert mit Hilfe des Gauß-Verfahrens das lineare Gleichungssystem $A^{(0)}\vec{x} = \vec{b}^{(0)}$ auf $A^{(N-1)}\vec{x} = \vec{b}^{(N-1)}$, mit der oberen Dreiecksmatrix $A^{(N-1)}$.

```
N = 3
A0 = rand(N,N)
b0 = rand(N)
x = Array{Float64}(N)

println("Ausgangsmatrix A0:\n", A0)
println("b0 =", b0)

A = copy(A0)
Ap1 = copy(A0)
b = copy(b0)
bp1 = copy(b0)

# Teil 1: Transformation auf obere Dreiecksmatrix

for n = 1:(N-1)
  for i = (n+1):N
    factor = A[i,n]/A[n,n]
    for j = 1:N
      Ap1[i,j] = A[i,j] - factor*A[n,j]
    end
    bp1[i] = b[i] - factor*b[n]
  end
  A = copy(Ap1)
  b = copy(bp1)
end

println("obere Dreiecksmatrix A^(N-1):\n",A)

# Teil 2: Berechnung von x

# ...
```

Dies entspricht Teil 1 des Gauß-Verfahrens (siehe Vorlesungsskript). In dieser Aufgabe soll der Teil ergänzt werden, in dem der Vektor $\vec{x}$ berechnet wird (Teil 2).

a) Wie lautet die Gleichung, mit der iterativ aus $A^{(N-1)}\vec{x} = \vec{b}^{(N-1)}$ die Komponenten des Vektors $\vec{x}$ bestimmt werden können? (2 Punkte)

b) Erweitern Sie das Programm so, dass der Vektor $\vec{x}$ entsprechend der Gleichung aus Teilaufgabe a) berechnet wird. Berechnen Sie auch zur Probe das Produkt $A^{(0)}\vec{x}$. (3 Punkte)

c) Lösen Sie mit dem erweiterten Programm aus Teilaufgabe b) das folgende lineare Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}\tfrac{1}{2}x_1 - 2x_2 + 2x_3 &= \tfrac{3}{2}\ ,\\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 &= 0\ ,\\ -x_1 - x_2 + 2x_3 &= 3\ .\end{aligned}$$

(2 Punkte)

**Aufgabe 2: harmonischer Oszillator – Hamiltonmatrix**

(6 Punkte)

Der Hamiltonoperator des verschobenen harmonischen Oszillators hat die Form

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

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

Mit

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \sqrt{2}\theta x = \frac{1}{2}(x + \sqrt{2}\theta)^2 - \theta^2 \tag{2}$$

folgt, dass das Spektrum der Eigenenergien von $H$ dem Spektrum des nichtverschobenen harmonischen Oszillators bis auf den Term $-\theta^2$ entspricht, es gilt also:

$$E_n = n + \frac{1}{2} - \theta^2\ . \tag{3}$$

In dieser Aufgabe soll dieses Spektrum numerisch durch Diagonalisierung der Hamiltonmatrix von $H$ bestimmt werden.

a) Schreiben Sie eine Funktion `Hmat(theta,N)`, welche die Hamiltonmatrix $\bar{H}$ mit $(\bar{H})_{mn} = \langle m|H|n\rangle$, $m, n = 0, 1, \ldots, N-1$, für beliebige $\theta$ und $N$ belegt (Struktur der Matrix: siehe Seite 33 im Vorlesungsskript). Veranschaulichen Sie die Belegung der Matrix für $N = 5$ und $\theta = 1$ mit Hilfe von `imshow`.
(3 Punkte)

b) Erstellen Sie ein Diagramm mit der Abhängigkeit des Spektrums der Eigenenergien von $\theta$ im Bereich $0 \leq \theta \leq 2$ und $N = 10$. Das Diagramm soll zusätzlich noch das Spektrum der exakten Eigenenergien enthalten, so dass die Abweichungen zwischen numerischer und exakter Lösung sichtbar werden.
(3 Punkte)

**Aufgabe 3: harmonischer Oszillator – Eigenfunktionen**

(8 Punkte)

Die Eigenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators lauten

$$\psi_n(x) = \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} \ (n = 0, 1, 2, \ldots) \ .$$

Dabei wurden $\hbar = 1$, $m = 1$ und $\omega = 1$ gesetzt. Für die Hermite-Polynome $H_n(x)$ gelten die Rekursionsgleichungen:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \ , \\ H_1(x) &= 2x \ , \\ H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \ (n = 1, 2, \ldots) \ . \end{aligned}$$

a) Schreiben Sie ein Programm, welches iterativ die Hermite-Polynome $H_n(x)$ berechnet (201 Stützstellen im Intervall $[-5, 5]$, also $\Delta x = 0.05$). Berechnen Sie damit die ersten fünf Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ $(n = 0, 1, \ldots, 4)$ und stellen Sie diese zusammen mit dem Potential $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ in einem Plot dar (in der üblichen Darstellung: $\psi_n(x) \to \bar{\psi}_n(x) = \psi_n(x) + E_n$). (3 Punkte)

b) Schreiben Sie ein Programm, welches die Matrixelemente der Matrix $D$ mit $D_{m,n} = (\psi_m, \psi_n)$ für $m, n = 0, 1, \ldots, N_H$ berechnet. Das Skalarprodukt $(\ldots, \ldots)$ ist dabei definiert als

$$(\psi_m, \psi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \psi_m^*(x) \psi_n(x) \ .$$

Hinweise: i) Verwenden Sie für die Integration die Trapezregel und schränken Sie den Integrationsbereich auf das Intervall $[-5, 5]$ ein; ii) für die exakten Eigenfunktionen gilt $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{m,n}$. Geben sie die Matrix in folgender Form an (hier für $N_H = 5$):

```
1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
0.000  1.000  0.000  0.000  0.000
0.000  0.000  1.000  0.000  0.000
0.000  0.000  0.000  1.000  0.000
0.000  0.000  0.000  0.000  1.000
```

(5 Punkte)