Übungsaufgaben zur Vorlesung

# Computerphysik

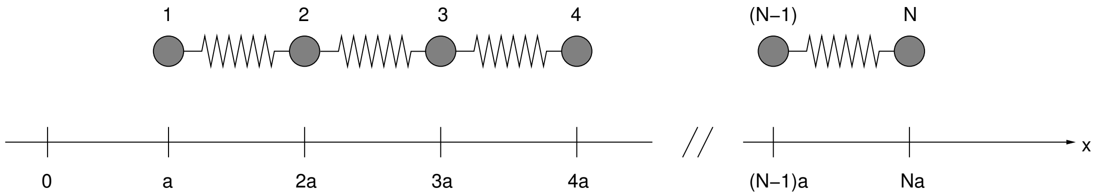
apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

**Blatt 9**: Abgabetermin: Montag, der 25.06.2018, 12:00

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

(10 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 $x_{n,0} = na$ $(n = 1, 2, \ldots, N)$ und die Auslenkungen aus den Ruhelagen durch $\xi_n = x_n - x_{n,0}$.

a) Wie lauten die Newtonschen Bewegungsgleichungen für die Auslenkungen $\xi_n(t)$? (2 Punkte)

b) Schreiben Sie die gekoppelten Differentialgleichungen aus Teilaufgabe a) in der Form
$$\frac{\mathrm{d}\vec{u}}{\mathrm{d}t} = \vec{f}(\vec{u}) \ . \tag{1}$$
(3 Punkte)

c) Schreiben Sie ein Programm, welches die gekoppelten Differentialgleichungen (1) mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahrens vierter Ordnung löst. Setzen Sie die Massen $m_i = m = 1$ $(i = 1, \ldots, N)$ sowie $k = 1$, $a = 1$. Betrachten Sie die folgenden Anfangsbedingungen:
$$\begin{aligned} \xi_1(0) &= 1 \ , \\ \xi_i(0) &= 0 \ , \quad (i = 2, \ldots, N) \ , \\ \dot{\xi}_i(0) &= 0 \ , \quad (i = 1, \ldots, N) \ . \end{aligned}$$
Die Zahl der Massenpunkte sei $N = 50$ und der Zeitschritt für das Runge-Kutta-Verfahren $\Delta t = 0.02$. Erstellen Sie einen Plot mit den Auslenkungen $\xi_n(t)$ $(n = 1, \ldots, 5)$ für das Zeitintervall $0 \leq t \leq 10$. (5 Punkte)

**Aufgabe 2: harmonischer Oszillator – Hamiltonmatrix**

(7 Punkte)

In Aufgabe 2 von Blatt 8 wurde das Spektrum der Eigenwerte des verschobenen harmonischen Oszillators

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

untersucht. Dabei wurde die Schrödingergleichung $H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$ auf ein Eigenwertproblem

$$\bar{H}\vec{\varphi}_k = E_k\vec{\varphi}_k$$

abgebildet, mit $(\bar{H})_{mn} = \langle m|H|n\rangle$, $(\vec{\varphi}_k)_n = \langle n|\varphi_k\rangle$ und $|n\rangle$ den Eigenfunktionen von $H_0 = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$.

Die Eigenfunktionen $\varphi_k$ erhält man über

$$|\varphi_k\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\varphi_k\rangle \ ,$$

dies entspricht im Ortsraum

$$\varphi_k(x) = \sum_n (\vec{\varphi}_k)_n \psi_n(x) \ .$$

(Die $\psi_n(x)$ wurden bereits in Aufgabe 3 von Blatt 8 bestimmt.)

In dieser Aufgabe soll der Grundzustand $\varphi_0(x)$ für $\theta = 1.5$ und verschiedene Werte von $N_b$ (der Zahl der berücksichtigten Basiszustände) berechnet werden.

Stellen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\varphi_0(x)|^2$ für den Grundzustand für $N_b = 2, 4, \ldots, 10$ zusammen mit dem exakten Ergebnis in einem Diagramm graphisch dar.