

## Computerphysik

Priv.-Doz. Dr. R. Bulla

SS 2009

**Blatt VIII:** Abgabetermin: Montag, der 22.06.2009, 12:00

### Aufgabe 19: harmonischer Oszillator; zeitabhängige Schrödinger- gleichung

Gegeben sei die zeitabhängige Schrödingergleichung für den eindimensionalen harmonischen Oszillator (hier für  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$  und  $\omega = 1$ )

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right] \bar{\psi}(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(x, t) . \quad (1)$$

Durch Separation der Variablen (Produktansatz  $\bar{\psi}(x, t) = \psi(x)f(t)$ ) erhält man daraus zwei gewöhnliche Differentialgleichungen. Die Lösung für den Zeitanteil hat die Form:

$$f(t) = e^{-i\omega t} , \quad \text{mit } E = \hbar\omega ,$$

die Lösungen für den Ortsanteil sind die  $\psi_n(x)$  aus Aufgabe 18. Die allgemeine Lösung von Gl. (1) lautet dann

$$\bar{\psi}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t} . \quad (2)$$

Zur Zeit  $t = 0$  sei die Wellenfunktion gegeben durch

$$\bar{\psi}_a(x, t = 0) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}(x-2)^2} ,$$

(siehe auch Aufgabe 18b), bzw.

$$\bar{\psi}_b(x, t = 0) = \theta(1-x)\theta(x) .$$

Bestimmen Sie numerisch die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen  $\bar{\psi}_a(x, t)$  und  $\bar{\psi}_b(x, t)$ . Hinweis: Bestimmen Sie zunächst die Koeffizienten  $c_n$ . Die Zeitabhängigkeit folgt dann direkt aus Gl. (2). Erzeugen Sie jeweils ein Diagramm mit der Ortsabhängigkeit des Betragsquadrats der Wellenfunktion für die Zeiten  $t_m = m\Delta t$ ,  $m = 0, \dots, 10$ , für einen sinnvollen Wert des Intervalls  $\Delta t$ .

[Abgabe: `ho-psit.c` per e-mail an Tutoren und Ausdruck der Diagramme]

(6 Punkte)

## Aufgabe 20: Matrixmultiplikation

Gegeben sind die folgenden  $n \times n$ -Matrizen:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & 3 & \ddots & & \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & & \\ & & & & n-1 & 1 \\ 0 & & & & 1 & n \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \cdots & & n-1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & & \\ 2 & 1 & 0 & \ddots & & \\ \vdots & 2 & \ddots & \ddots & & \\ & & & & 0 & 1 \\ n-1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- a) Berechnen Sie für  $n = 5$  das Matrixprodukt  $M = AB$  und schreiben Sie die Matrix  $M$  in geeigneter Darstellung in die Datei `matrix.dat` (via `fprintf`).  
[Abgabe: `mat1.c` und `matrix.dat` per e-mail an Tutoren]
- b) Berechnen Sie für  $n = 10$  die Produkte  $A^k$  und  $B^k$ ,  $k = 1, \dots, 10$ , und berechnen Sie  $\text{Sp}(A^k)$  und  $\text{Sp}(B^k)$ .  
[Abgabe: `mat2.c` per e-mail an Tutoren]

(6 Punkte)