

Computerphysik

Priv.-Doz. Dr. R. Bulla

SS 2012

Blatt 8: Abgabetermin: Montag, der 11.06.2012, in der Vorlesung; [E-Mails an Tutoren bis 11.06.2012, 12:00]

Aufgabe 1: harmonischer Oszillator; zeitabhängige Schrödingergleichung

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:

$$f(t) = e^{-iEt} ,$$

die Lösungen für den Ortsanteil sind die $\psi_n(x)$ aus Aufgabe 1 von Blatt 7. 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 1b von Blatt 7), 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 Δt .

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

(6 Punkte)

Aufgabe 2: Matrixmultiplikation

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

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

- 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: `mat-mult1.c` und `matrix.dat` per E-Mail an Tutoren]
- Berechnen Sie für $n = 6$ die Produkte A^k und B^k , $k = 1, \dots, 5$, und berechnen Sie $\text{Sp}(A^k)$ und $\text{Sp}(B^k)$.
[Abgabe: `mat-mult2.c` per E-Mail an Tutoren]

(6 Punkte)