Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klessen / Spurzem

Sommersemester 2008

Blatt 4 (Abgabe bis spätestens 16. Mai 2008)

Präsenzübung

Neutronen im Gravitationsfeld

In der Vorlesung wurde der Numerov-Algorithmus als effiziente Methode zur Lösung der Schrödingergleichung vorgestellt. Eine mgliche Anwendung ist die Berechnung von stationären gebundenen Zuständen $\Psi(z)$ von Neutronen im Gravitationsfeld der Erde (vgl. `http://www.uni-heidelberg.de/presse/news/2201abele.html`, Heidelberger Beteiligung). Sie müssen der eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\Psi''(z) + \frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(z)\Big)\Psi(z) = 0 \tag{0.1}$$

genügen. Dabei ist im Schwerefeld der Erde $V(z) = mgz$ für $z \geq 0$; durch einen horizontalen Spiegel am Erdboden, an dem (langsame) Neutronen komplett reflektiert werden, wird $V(z) = \infty$ für $z < 0$. Gesucht wird also wegen $\Psi(z) = 0$ (für $z \leq 0$) die Lösung nur für $z \geq 0$.

Nach geeigneter Wahl der Längen- und Energieeinheiten (spezifizieren Sie diese!!) läßt sich die Gleichung für $x > 0$ in der Form

$$\psi''(x) + (\varepsilon - x)\psi(x) = 0 \tag{0.2}$$

schreiben.

Programmieren Sie den Numerov-Algorithmus zur numerischen Lösung dieser Schrödinger-Gleichung (d.h. $y^{''}(x) + k(x)y(x) = 0$, mit $k(x) = \varepsilon - x$).

Anmerkung: Falls Sie Ihr Programm mit einer bekannten analytischen Lösung testen wollen, betrachten Sie den quantenmechanischen harmonischen Oszillator:

$$\psi''(x) + (2\varepsilon - x^2)\psi(x) = 0 \tag{0.3}$$

mit den bekannten Lösungen (Hermite-Polynome $H_n(x)$):

$$\psi(x) = \frac{H_n(x)}{\left(2^n n! \sqrt{\pi}\right)^{1/2}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \tag{0.4}$$

welche sich für die Energie-Eigenwerte $\varepsilon = n + 1/2$ ergeben (vgl. Skript Kap. 5). Sie sollten bei den Randbedingungen $\psi(0) = y_0 \neq 0$ für die geraden (symmetrischen) Eigenfunktionen und $\psi(0) = 0$ und $\psi(h) = y_1 \neq 0$ für die ungeraden (antisymmetrischen) Eigenfunktionen wählen (h: Schrittweite, die Zahlenwerte y_0 und y_1 sind beliebig, sie beeinflussen lediglich die Normierung der Eigenfunktion).

Hausaufgabe 20 Punkte

Neutronen im Gravitationsfeld

Die Schrödinger-Gleichung für Neutronen im Gravitationsfeld (siehe Präsenzaufgabe mit $V(x) = x$) soll numerisch mit dem Numerov-Verfahren gelöst werden. Die Quantisierung der Energie ergibt sich aus der Forderung der Normierbarkeit an die Wellenfunktion. Startet man die Integration der Schrödingergleichung mit $\psi(0) = 0$ und $\psi(h) = y_1 \neq 0$, so gilt für fast alle Werte der skalierten Energie ε $\psi \to \pm\infty$ für $x \to \infty$. Nur für eine diskrete Menge von Energie-Eigenwerten ε_n gilt $\psi \to 0$ für $x \to \infty$ - eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Normierbarkeit der Wellenfunktion. Diese Werte von ε_n entsprechen den quantisierten Energien des Systems.

- Lösen Sie mit Hilfe des Numerov-Algorithmus mit den Anfangsbedingungen $\psi(0) = 0$ und $\psi(h) = y_1 \neq 0$ mit der Schrittweite $h = 0.01$ die Schrödingergleichung für das Neutron im Gravitationsfeld numerisch. Erhöhen Sie die Energie ε schrittweise von einem Anfangswert (0.5) und beobachten Sie was für Werte $x \gg \varepsilon$ (also weit im klassisch verbotenen Bereich) mit der Wellenfunktion passiert. Wie sollte in diesem Bereich die Wellenfunktion eines gebunden Zustandes aussehen? Plotten Sie die Lösungen wenigstens für fünf verschiedene Energiewerte. Einen sinnvollen Wertebereich für ε entnehmen Sie aus der nächsten Teilaufgabe (10 Punkte).

- Beim Durchlaufen der Energie eines gebundenen Zustandes ändert die Wellenfunktion für $x \gg \varepsilon$ ihr Vorzeichen. Verwenden Sie diese Eigenschaft, um die Energien der ersten drei gebundenen Zustände auf zwei Nachkommastellen zu bestimmeni (10 Punkte).