

Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klassen / Spurzem

Sommersemester 2008

Blatt 9 (Abgabe bis spätestens 20. Juni 2008)

Präsenzübung

Verwendung von Numerical Recipes Routinen

- Mathematica: Berechnung von Norm und Konditionszahl einer Matrix. U.a. das Beispiel $M = \{a_{ij}\} = 1/(i+j-1)$ mit $i, j = 1, \dots, N$, einer Diagonalmatrix, und einer Matrix aus der Populationsdynamik untersuchen (N im Bereich $2, \dots, 10$).
- Eigenwert- und Eigenvektorbestimmung mit Mathematica (Beispiele aus obiger Aufgabe, andere Beispiele).
- Initialisieren und Verwendung der Numerical Recipes Routinen `tred2` und `tqli` zur Berechnung von Eigenwerten eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators.
- Reduktion symmetrischer Matrizen auf Tridiagonalform mit Hilfe der Numerical Recipes Routine `tred2`.
- Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren einer Tridiagonalmatrix mit Hilfe der Numerical Recipes Routine `tqli`.

Testen Sie die Routinen durch Vergleich mit Mathematica und mit Hilfe der bekannten Eigenwerte des ungestörten harmonischen Oszillators. In dimensionloser Form ist dessen Hamiltonoperator

$$\tilde{h}_0 = \frac{H}{\hbar\omega} = \left(\frac{1}{2}\Pi^2 + \frac{1}{2}Q^2 \right) \quad (0.1)$$

mit den Eigenwerten $n + 1/2$, mit der Matrixdarstellung des diagonalisierten \tilde{h}_0 :

$$(\tilde{h}_0)_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{nm} \quad (0.2)$$

Hausaufgabe 20 Punkte

Quantenmechanische Energie-Eigenwerte im gestörten harmonischen Oszillator

Man berechne mit diesen Werkzeugen die Eigenwerte eines gestörten quantenmechanischen harmonischen Oszillators für den Grundzustand $n = 0$ und die angeregten Zustände $n = 1, 2, 3, 4, \dots, 9$ durch Approximation der Hilbertraumoperatoren mit Matrizen endlicher Dimension variierend im Bereich $N = 15, \dots, 30$.

Der dimensionslose Hamiltonoperator in Matrixschreibweise (Ableitung im Vorlesungsskript nachzulesen) lautet

$$\tilde{h} = \frac{H}{\hbar\omega} = \left(\frac{1}{2}\Pi^2 + \frac{1}{2}Q^2 + \tilde{\lambda}Q^4 \right) \quad (0.3)$$

$$(\tilde{h})_{nm} = (\tilde{h}_0)_{nm} + \tilde{\lambda}(Q^4)_{nm} , \quad (0.4)$$

wobei angenommen werden darf $(\tilde{h}_0)_{nm} = (n + \frac{1}{2})\delta_{nm}$ (ungestörter Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators in einer geeigneten Basis von Hermite-Polynomen).

- Bestimmen Sie die Matrixdarstellung von Q^4 , unter Verwendung von (aus der Vorlesung)

$$Q_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n+1} \delta_{n,m-1} + \sqrt{n} \delta_{n,m+1} \right) \quad (0.5)$$

(6 Punkte)

- Berechnen Sie die Eigenwerte von $(\tilde{h})_{nm}$ ($\tilde{\lambda} = 0.1$) als Funktion der gewählten Matrixgröße zwischen 15 und 30 mit Hilfe der Numerical Recipe's Routinen `tred2` und `tq1i`. In diesem Teil der Aufgabe sollte nachvollziehbar sein, daß Ihr Programm richtig arbeitet - es reicht nicht einfach die Eigenwerte aufzuschreiben. (8 Punkte)
- Berechnen Sie analytisch die Eigenwerte. (6 Punkte)