Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klessen / Spurzem

Sommersemester 2009

Blatt 11 (Abgabe bis spätestens 26. Juni 2009)

Präsenzübung

Teil 1: 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 $i, j = 1, \ldots, N$, einer Diagonalmatrix, und einer Matrix aus der Populationsdynamik untersuchen (N im Bereich $2, \ldots, 10$).
- 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`.

Test der Routinen durch Vergleich mit Mathematica und mit Hilfe der bekannten Eigenwerte des ungestörten harmonischen Oszillators; in dimensionloser Form ist dessen Hamiltonoperator

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

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

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

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 $n = 1, 2, 3, 4, \ldots, 9$ durch Approximation der Hilbertraumoperatoren mit Matrizen endlicher Dimension variierend im Bereich $N = 15, \ldots, 30$.

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

$$\begin{aligned} \tilde{h} &= \frac{H}{\hbar\omega} = \left(\frac{1}{2}\Pi^2 + \frac{1}{2}Q^2 + \tilde{\lambda}Q^4\right) & (3) \\ (\tilde{h})_{nm} &= (\tilde{h}_0)_{nm} + \tilde{\lambda}(Q^4)_{nm} & (4) \end{aligned}$$

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).

Teil 1: Bestimmen Sie die Matrixdarstellung von Q^4, unter Verwendung von

$$Q_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n,m-1} + \sqrt{n}\,\delta_{n,m+1}\right) \qquad (5)$$

(6 Punkte)

Teil 2: 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 `tqli`. Hier sollte nachvollziehbar sein, dass Ihr Programm richtig arbeitet, es reicht nicht die Eigenwerte einfach aufzuschreiben. (8 Punkte)

Teil 3: Berechnen Sie analytisch die Eigenwerte. (6 Punkte)