Computergestütztes wissenschaftliches Rechnen SS 2007

Übungsblatt 7

Georg-August-Universität Göttingen
Institut für Theoretische Physik
PD Dr. A. Honecker, S. Fuchs, J. Lampe

Aufgabe 1

Wir betrachten den diskretisierten Hamilton-Operator für ein freies Teilchen

$$(\mathcal{H}\,\Psi)_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\Psi_{r+1} - 2\,\Psi_r + \Psi_{r-1}}{\Delta x^2}$$

auf einem Intervall $[0, L]$ der Länge L mit periodischen Randbedingungen, d.h.

$$\Psi(x + L, t) = \Psi(x, t)\,.$$

Implementieren Sie für diesen Fall die Zeitentwicklung mit dem impliziten Euler-Verfahren 2. Ordnung und einer Auflösung $\Delta x = L/1024$, $\Delta t = (m\,\Delta x\,L)/(20\,\hbar)$! Als Anfangsbedingung sei ein um x_0 zentriertes Gaußsches Wellenpaket gegegeben

$$\Psi_{x_0,k_0}(x, t = 0) = C\,\mathrm{e}^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}}\,\mathrm{e}^{i\,k_0\,x}\,. \tag{1}$$

Als Parameter betrachten wir hierbei $x_0 = L/4$, $\sigma = L/8$, $k_0 = 10\pi/L$.

a. Berechnen Sie die Entwicklung bis zur Zeit $t = (m\,L^2)/(50\,\hbar)$!

b. Überzeugen Sie sich, dass die Wellenfunktion (1) während der Zeitentwicklung ihre Form beibehält, wobei sich der Schwerpunkt $\langle x\rangle(t) = x_0 + \langle v\rangle\,t$ mit Geschwindigkeit

$$\langle v\rangle = \frac{\hbar\,k_0}{m}\,,$$

bewegt !

c. Untersuchen Sie, wie sich die Breite des Wellenpakets

$$\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

mit der Zeit entwickelt !

Aufgabe 2

a. Modifizieren Sie das Programm aus Aufgabe 1 so, dass es ein beliebiges Potential $V(x)$ zuläßt !

b. Wählen Sie als Parameter $\Delta x = L/1024$, $\Delta t = (m\,\Delta x\,L)/(100\,\hbar)$ sowie für die Anfangsbedingungen ein Gaußsches Wellenpaket (1) mit $x_0 = L/5$, $\sigma = L/32$, $k_0 = 64\,\pi/L$! Wir betrachten nun eine Potential-Barriere

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < L/2, \\ V_0 & \text{für } L/2 \leq x \leq L/2 + a, \\ 0 & \text{für } x > L/2 + a, \end{cases}$$

mit der Breite $a = L/64$ und der Höhe $V_0 = 2 \cdot 10^4\,\frac{\hbar^2}{m\,L^2}$. Simulieren Sie die Streuung des Wellenpaketes an dieser Rechteck-Barriere mit dem impliziten Euler-Verfahren 2. Ordnung bis zur Zeit $\hbar\,t/m = L^2/200$!

c. Berechnen Sie sowohl die Wahrscheinlichkeit $P_l(t) = \int_0^{L/2} \mathrm{d}x\,P(x,t)$ das Teilchen links von der Barriere zu finden als auch die Wahrscheinlichkeit $P_r(t) = \int_{L/2+a}^{L} \mathrm{d}x\,P(x,t)$ das Teilchen rechts von der Barriere zu finden ! Schätzen Sie die Reflektionswahrscheinlichkeit über $R = P_l(t_s)/P_l(0)$ sowie die Transmissionswahrscheinlichkeit über $T = P_r(t_s)/P_l(0)$ durch geeignete Wahl des Zeitpunkts t_s !