



## Aufgabe 1

Wir wollen das Tunneln im Doppelmulden-Potential

$$V(x) = m \omega^2 \frac{(x - x_m)^2 (x + x_m)^2}{8 x_m^2}$$

simulieren (vgl. Kapitel 4.3.3 des Skripts). Dazu wählen wir „natürliche Einheiten“  $\hbar = m = \omega = 1$ .

- a. Implementieren Sie analog zu Übungsblatt 7 das Operator-Splitting-Verfahren für einen eindimensionalen Hamilton-Operator mit allgemeinem Potential  $V(x)$  auf einem Intervall  $[0, L]$  der Länge  $L$  mit periodischen Randbedingungen ! Verwenden Sie für die kinetische Energie dabei die quadratische Form

$$E_s^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m} = \begin{cases} \frac{\hbar^2 (2\pi s)^2}{2m L^2} & \text{für } s \leq N/2, \\ \frac{\hbar^2 (2\pi (N-s))^2}{2m L^2} & \text{für } s \geq N/2 ! \end{cases}$$

**Hinweis:** Implementierungen der auch hier benötigten FFT wurden Ihnen bereits zusammen mit Übungsblatt 3 zur Verfügung gestellt.

- b. Wenden Sie nun Ihr Programm aus Aufgabenteil a auf das Doppelmulden-Potential an ! Wählen Sie dabei ein Intervall  $[-4x_m, 4x_m]$  mit periodischen Randbedingungen, d.h.  $\Psi(x+L, t) = \Psi(x, t)$  mit  $L = 8x_m$  ! Wählen Sie  $1024 = 2^{10}$  Stützstellen, d.h.  $\Delta x = L/1024$ , sowie  $\Delta t = 1/20$  ! Wir betrachten nun den Fall  $x_m = 3$ . Bei  $t = 0$  sitze das Teilchen im linken Potentialminimum, d.h.  $\Psi(x, t = 0)$  ist gegeben durch

$$\Psi_{-x_m}(x) = C e^{-(x+x_m)^2/2}.$$

Führen Sie eine Simulation bis zur Zeit  $t = 2000$  durch ! Betrachten Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit als Funktion der Zeit  $t$  und berechnen Sie den Erwartungswert des Ortes  $\langle x \rangle(t)$  ! Extrahieren Sie aus  $\langle x \rangle(t)$  die größte Oszillationsperiode  $\tau$  und schätzen Sie mit Glg. (4.85) des Skripts die Aufspaltung  $E_1 - E_0$  !

- c. Berechnen Sie die Energie  $E(t) = \langle \mathcal{H} \rangle$  ! Da der Hamilton-Operator nicht explizit zeitabhängig ist, sollte  $E(t) = E$  zeitunabhängig sein. Testen Sie Ihr Ergebnis auf diese Eigenschaft und diskutieren Sie mögliche Abweichungen !

**Hinweis:** Da die kinetische Energie im Impulsraum definiert ist, benötigen Sie bei der Energieberechnung eine FFT.

- d. Schalten Sie nun eine Dämpfung ein, indem Sie  $\Delta t = 1/20 - i/40$  wählen und die Simulation wiederholen ! Schätzen Sie die Grundzustandsenergie  $E_0$  über den Erwartungswert des Hamilton-Operators  $\langle \mathcal{H} \rangle$  im späten Bereich dieser Simulation !

**Hinweis:** Um Bereichsüberläufe zu vermeiden, sollte die Wellenfunktion nach jedem Zeitschritt  $\Delta t$  neu normiert werden.

**Bemerkung:** Wesentliche Teile dieser Aufgabe können auch mit dem impliziten Euler-Verfahren 2. Ordnung von Übungsblatt 7 bearbeitet werden.