Numerische Methoden der Physik – Aufgabenblatt 04

Marc Wagner – Institut für Theoretische Physik – Goethe-Universität Frankfurt am Main

16. November 2011 (Besprechung am 30. November/1. Dezember 2011)

Aufgabe 07

Studieren Sie die Quantenmechanik eines Teilchens der Masse m, welches sich in einer Dimension im Potential

$$V(x) \quad \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^4$$

bewegt.

(a) Stellen Sie die Schrödinger-Gleichung auf. Führen Sie geeignete dimensionslose Größen ein, um eine numerische Behandlung zu erleichtern. Ist es möglich (wie zum Beispiel beim harmonischen Oszillator) mit einer einzigen numerischen Rechnung Aussagen für beliebige Parameter m, ω und λ zu treffen? Falls nicht, geben Sie den dimensionslosen Parameter an, der verschiedene physikalische Situationen charakterisiert.

(b) Implementieren Sie die in der Vorlesung besprochene Shooting-Methode, um die durch die Schrödinger-Gleichung definierten Energieeigenwerte und Wellenfunktionen numerisch zu bestimmen. Welche Rand- beziehungsweise Anfangsbedingungen sind zweckmäßig?

(c) Testen Sie Ihr Programm, indem Sie die Grundzustandsenergie für "kleine" λ numerisch bestimmen und mit entsprechenden analytischen Näherungsergebnissen vergleichen. Besorgen Sie sich Letztere mit Hilfe von zeitunabhängiger Störungstheorie.

(d) Berechnen Sie für die Parameter

$$\frac{2\hbar\lambda}{m^2\omega^3} = \{0.1\,,\,10.0\}$$

die niedrigsten drei Energielevels auf numerischem Weg. Interpretieren Sie Ihre Ergebnisse.