

Rechnernutzung in der Physik

Institut für Experimentelle Teilchenphysik
Institut für Theoretische Teilchenphysik
Interfakultatives Institut für Anwendungen der Informatik

Prof. Dr. U. Husemann, Dr. V. Shtabovenko
Dr. A. Mildenerger, Dr. T. Chwalek

WS2019/20 – Blatt 3

<http://comp.physik.kit.edu>

Bearbeitungszeitraum: bis Di, 19.11.2019

Aufgabe 5: Potentialtopf (*)

Betrachten Sie einen eindimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden, gegeben durch

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq -1 \\ 0 & \text{für } -1 < x < -a \\ V_1 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } a < x < 1 \\ \infty & \text{für } 1 \leq x \end{cases},$$

mit $a = 1/4$. V_1 kann sowohl positiv als auch negativ sein. Ziel der Aufgabe ist es, die Schrödinger-Gleichung numerisch zu lösen, d. h. die Bestimmung der Energieeigenwerte E_n und der dazu gehörenden Wellenfunktionen $\psi_{E_n}(x) \equiv \psi_n(x)$. Verwenden Sie dabei $\hbar = m = 1$.

- (a) Lösen Sie mit Hilfe der Funktion `ParametricNDSolve` (verfügbar ab MATHEMATICA 9) die Schrödinger-Gleichung in Abhängigkeit von der Energie E als Anfangswertproblem mit $\psi_E(-1) = 0$ und $\psi'_E(-1) = 1$. Stellen Sie für
- (i) $V_1 = 0$ $E \in \{0.75, 1.25, \dots, 5.25\}$
 - (ii) $V_1 = +30$ $E \in \{5, 5.4, \dots, 7\}$
 - (iii) $V_1 = -30$ $E \in \{-21.73, -21.725, \dots, -21.7\}$ und $E \in \{-3, -2.7, \dots, -1.2\}$

jeweils die Kurvenschar $\psi_E(x)$ graphisch dar. Für welche Werte von E wird die Randbedingung $\psi_E(1) = 0$ näherungsweise erfüllt? *Hinweis:* Die zusätzliche Bedingung $\psi'_E(-1) = 1$ stellt keine Einschränkung dar, da die Wellenfunktion ohnehin nachträglich normiert wird.

- (b) Benutzen Sie die Funktion `FindRoot`, um für $V_1 = -30, 0, +30$ jeweils die beiden niedrigsten Eigenwerte E_0 und E_1 zu bestimmen. Die in (a) ermittelten Energiewerte sind dabei als Startwerte geeignet.
- (c) Stellen Sie für $V_1 = -30, 0, +30$ in jeweils einem Schaubild die zu den ermittelten Eigenwerten gehörenden normierten Wellenfunktionen grafisch dar.
- (d) **(freiwillig)** Schreiben Sie ein Module, das in Abhängigkeit von V_1 , a und ggf. weiteren Parametern (die ersten) n Eigenwerte berechnet.

Aufgabe 6: Ersetzungsregeln

- Berechnen Sie mittels Substitutionsregeln beliebige ganzzahlige positive Potenzen beliebiger Zahlen.
- Wiederholen Sie dieses Vorgehen für die Fakultät einer ganzen Zahl.
- Modifizieren Sie Ihre Lösung für Fakultäten so, dass Sie auch die 2-er Fakultät berechnen können ($7!! = 7 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 1 = 105$).

Probieren Sie möglichst wenig einfache Regeln zu finden. Dabei ist die Verwendung von Power oder Factorial natürlich verboten!

Hinweise:

- Verwenden Sie sog. „Dummy“-Symbole (Schaffen Sie es auch ohne Dummy-Funktionen, also ohne Argumentenliste auszukommen?).
- Versuchen Sie, aus einfachen Rechenoperationen Ausdruckstrukturen zu bilden, die den Definitionen von Potenz oder Fakultät ähneln.
- Einfache Zahlen sind absolut zulässige Patterns.
- Regeln in einer Liste werden von links nach rechts ausgewertet, wobei das Ergebnis einer Ersetzung für nachfolgende Regeln einer Liste gesperrt ist.
- Regeln lassen sich auch auf Listen anwenden.

Sie können die unten aufgeführte Funktion `stepwiseReplaceRepeated[expr, rules]` statt `expr //. rules` verwenden, um sich Zwischenschritte wiederholter Anwendung von Regeln anzeigen zu lassen (mit „//.“ lassen sich nicht endende Substitutionsketten sehr leicht erzeugen). Beachten Sie dabei: `rules` muss immer eine Liste sein und als optionales Argument lässt sich die Anzahl maximaler Iterationen angeben, welche standardmäßig 100 beträgt.

```
In[1]:= Options[stepwiseReplaceRepeated]={info->True};
stepwiseReplaceRepeated[expr_, rules_List, maxIts_:100,
opts:OptionsPattern[]]:=
Module[{res=expr, resOld, f},
  f={
    resOld=res;
    res=res/.rules;
    (* Abbruch, wenn Subst. nichts mehr bewirkt *)
    If[res===resOld, Return[res]];
    If[OptionValue[info], Print[res]]
  }&;
  (* max. Anzahl an Iterationen *)
  f/@Range[maxIts];
  Return[res]
]
```

Ein Notebook mit dieser Funktion und zwei Beispielen zu ihrer Anwendung finden Sie unter `aufgabe6_skel.m` auf der Vorlesungshomepage.