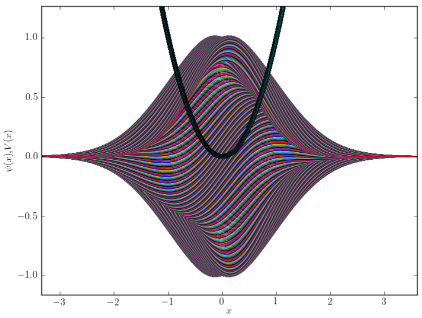
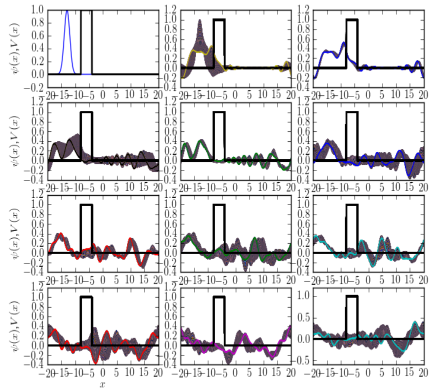
Numerische Auswertungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung in einigen interessanten Potentialen

Maturaarbeit von Nima Moshayedi



$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$



Die Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung ist eines der wichtigsten Hilfsmittel der modernen Physik, nämlich der Quantenmechanik. Sie bestimmt die Entwicklung des zeitlichen Zustands in einem Quantensystem. Die Schrödingergleichung ist eine Differentialgleichung für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x},t)$, welche als Eigenschaft der Teilchen in Quantensystemen betrachtet wird, denn diese haben sowohl Teilchen als auch Wellencharakter[1]. Die Schrödingergleichung wurde von Erwin Schrödinger im Jahre 1926 erstmals als Wellengleichung aufgestellt und lieferte die Äquivalenz zur Matrizenmechanik. Mit der Schrödingergleichung können wir einem bestimmten Teilchen einen bestimmten Standort zuweisen. Für jede Veränderung mit der Zeit, einem sogenannten Zustandswechsel, kann man diese Bestimmung durchführen, indem man die Wellenfunktion in Abhängigkeit der Zeit und den Koordinaten aufstellt. Dies kann man durch eine zeitlich veränderliche Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x},t) = \psi(x,y,z,t)$ beschreiben.

Die Fourier-Transformation

Beschreibung

Die Transformation einer Funktion $f(x)$ zu einer Funktion $F(k)$ in den k-Raum nennt man kontinuierliche Fourier-Transformation von $f(x)$ zu $F(k)$, wobei der k-Raum bei der Transformation der Wellenfunktion, in den Impulsraum übergeht. Durch die Fourier-Transformation können wir aperiodische Signale in ein kontinuierliches Spektrum zerlegen. Die Fourier-Transformation einer Funktion $f(x)$ zu $F(k)$ und die inverse Fourier-Transformation von $F(k)$ zu $f(x)$ sind wie folgt beschrieben:

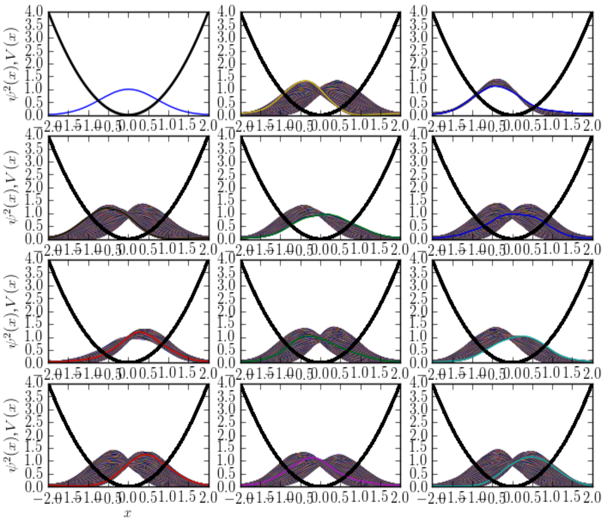
$$\mathcal{F}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{ikx} dx = F(k) \qquad (1)$$

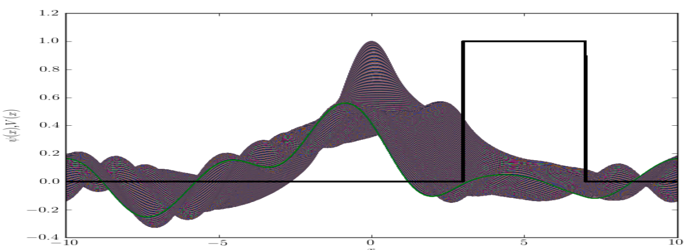
$$\bigcirc \xrightarrow{\text{Ortsraum zu Impulsraum}} \bullet$$

$$\mathcal{F}^{-1}[F(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\, e^{-ikx} dk = f(x) \qquad (2)$$

$$\bullet \xrightarrow{\text{Impulsraum zu Ortsraum}} \bigcirc$$

Diese Methode macht es möglich die Schrödingergleichung, welche eine partielle Differentialgleichung ist, numerisch zu lösen und die Wellenfunktion zu betrachten.





Die Methode der Fourier-Transformation zur Lösung partieller Differentialgleichungen

Es gibt viele verschiedene Arten die Schrödingergleichung als partielle Differentialgleichung zu lösen. Die Methode, für die ich mich entschieden habe ist die Methode der Fourier-Transformation, da sie gut durchführbar ist und beim Programmieren auch nicht zu komplexe Arbeit geleistet werden muss. Wir benutzen die Definition

$$k = \frac{p}{\hbar} \qquad (1)$$

um uns im Impulsraum zu orientieren.

Der Gedanke ist, dass wir die Schrödingergleichung Fourier-Transformieren, damit aus der partiellen Differentialgleichung eine gewöhnliche Differentialgleichung entsteht, die wir mit einfachen Methoden lösen können, wobei wir als Lösung die Wellenfunktion $\tilde{\psi}(k,t)$ bekommen, welche im Impulsraum beschrieben wird. Wir betrachten das ganze in einer Dimension.

Die Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi. \qquad (2)$$

Wir betrachten nun die Fourier-Transformierte von ψ:

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)e^{ikx}dx \qquad (3)$$

mit der inversen Fourier-Transformierten

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(k,t)e^{-ikx}dk. \qquad (4)$$

Nun nimmt man die zeitliche und örtliche Ableitung dieser letzten Gleichung und substituiert es in die zeitabhängige Schrödingergleichung. Nun können wir die Gleichungen in zwei Teile spalten: Der erste Teil beinhaltet den Impulsteil des Hamiltonoperators und wir schreiben im k-Raum:

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\psi}. \qquad (5)$$

Der zweite Teil beinhaltet das Potential $V(x)$, und wir schreiben im Ortsraum:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = V(x)\psi. \qquad (6)$$

Die Lösungen sind demnach

$$\tilde{\psi}(k,t+\Delta t) = \tilde{\psi}(k,t)\exp\left(-\frac{i\hbar k^2\Delta t}{2m}\right) \qquad (7)$$

und

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t)\exp\left(-\frac{iV(x)\Delta t}{\hbar}\right). \qquad (8)$$

Auf diese Art ist es einfach den Impulsteil des Hamiltonoperators im k-Raum und den Potentialteil im x-Raum zu lösen. Für das Lösen der Gleichung, wechseln wir zwischen x- und k-Raum und machen kleine Schritte in beiden Räumen.

Durch Zeitschritte Δt können wir das System wie folgt zum Fortschritt bringen:

1. $\psi \leftarrow \psi\exp\left(\frac{-iV(x)\Delta t}{2\hbar}\right)$ *(Schritt des Potentialteils des Hamiltonoperatos um $\frac{\Delta t}{2}$.)*
2. Übergang von ψ zu $\tilde{\psi}$ *(in den k-Raum gehen, damit wir den Schritt im Impulsteil des Hamiltonoperators durchführen können).*
3. $\tilde{\psi} \leftarrow \tilde{\psi}\exp\left(\frac{-i\hbar k^2\Delta t}{2m}\right)$ *(Schritt des Impulsteils des Hamiltonoperators um $\frac{\Delta t}{2}$).*
4. Übergang von $\tilde{\psi}$ zu ψ *(in den x-Raum zurück gehen, damit wir den Schritt wieder im Potentialteil des Hamiltonoperators durchführen können).*
5. $\psi \leftarrow \psi\exp\left(\frac{-iV(x)\Delta t}{2\hbar}\right)$ *(Schritt des Potentialteils des Hamiltonoperators um $\frac{\Delta t}{2}$, Ergänzung des Zeitschrittes).*