

Quantenmechanik von 1D-Potentialen I: Eigenwerte, Eigenfunktionen

Bestimmen Sie für den harmonischen Oszillator mit Potential $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ die Eigenenergien und Eigenfunktionen mittels Ortsraumdiskretisierung.

- Vergleichen Sie die niedrigsten numerisch bestimmten Eigenenergien mit den bekannten analytischen Werten.
- Stellen Sie die normierten Eigenfunktionen grafisch dar und vergleichen Sie mit den bekannten Lösungen (Normierung: $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$).
- Hierbei bekommen Sie schnell ein Gefühl für die Abhängigkeit der Ergebnisse von den numerischen Parametern (Matrixgröße N bzw. Diskretisierungsschrittweite δx , betrachtetes Intervall $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$).

Aufgabe 6.1:

(16 Punkte)

Bestimmen Sie für ein Teilchen im asymmetrischen Doppelmuldenpotential $V(x) = x^4 - x^2 + Ax$ mit $A = 0,055$ alle Eigenenergien kleiner 0,15 und die zugehörigen Eigenfunktionen für $\hbar_{\text{eff}} = 0,06$.

- Verwenden Sie eine separate Funktion für die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenfunktionen (Aufstellen der Matrix, Diagonalisierung und Normieren der Eigenfunktionen).
- Visualisieren Sie die Ergebnisse, indem Sie die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$, geeignet skaliert, auf Höhe der Eigenenergie darstellen. Zeichnen Sie ebenfalls das Potential. Zeichnen Sie nur die Eigenfunktionen für die $E_n < 0,15$. Zeichnen Sie die Eigenenergien als horizontale Linien ein.

Verwenden Sie auch für diese Visualisierung eine separate Funktion.

- Diskutieren Sie im Kommentar am Ende des Programms folgende Punkte:
 - a) Begründen Sie Ihre Wahl der numerischen Parameter (Diskretisierungsschrittweite δx bzw. Matrixgröße N , betrachtetes Intervall $[x_{\min}, x_{\max}]$).
 - b) Diskutieren Sie die Struktur und Abfolge der Eigenfunktionen, insbesondere auch in Hinblick auf den Knotensatz.
Was ändert sich für kleinere bzw. größere \hbar_{eff} ?
 - c) Beschreiben und diskutieren Sie die Eigenwerte und Eigenfunktionen für den Fall $A = 0$.

Vorgaben und Hinweise:

- ❶ Zum Füllen einer Matrix entlang einer vorgegebenen Diagonalen kann der Befehl `diag` (aus dem Modul `numpy`) verwendet werden.

Beispiel:

```
import numpy as np
print(np.diag(np.arange(5), k=-1))
```

- ❶ Zur Diagonalisierung einer hermiteschen Matrix sollte die Routine `eigh` aus `scipy` verwendet werden, da diese die Eigenwerte geordnet zurückgibt.

```
from scipy.linalg import eigh
help(eigh)
```

Der Aufruf `ew, ev = eigh(matrix)` liefert im Array `ew` die Eigenwerte und im zweidimensionalen Array `ev` die Eigenvektoren des zweidimensionalen Arrays `matrix`.

- ❶ Zur Normierung der Eigenfunktionen, $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, beachten Sie, dass die Routine `eigh` die Eigenvektoren so normiert, dass `np.sum(np.abs(ev[:, i])**2)` Eins ergibt.