Fallstudien Numerik: Quantenmechanik
WS 2012/13

Übungsblatt 6

Technische Universität München

Aufgabe 12: Split-Step Fourier Methode

Zur Lösung von **Aufgabe 9** haben Sie einen Algorithmus geschrieben, der eine Ortsraumdiskretisierung mittels Fourierkollokation durchführt.

a) Erweitern Sie diesen Algorithmus so, dass er auf beliebigen Intervallen $[a, b] \subset \mathbb{R}$ arbeitet.

b) Implementieren Sie zur Zeitpropagation eine Split-Step Methode, wie sie in Pseudocode in [L], **Algorithmus 3.1** beschrieben ist.

Aufgabe 13: Erhaltungsgrößen

Betrachten sie

1. die Galerkin-Methode mit Matrixexponentialfunktion `expm` als Zeitpropagation,

2. Fourier-Kollokation, wobei die Zeitpropagation mittels der Chebychev Methode durchgeführt wird und

3. die Split-Step Fourier Methode aus **Aufgabe 12**.

Testen Sie die von Ihnen implementierten Algorithmen auf die nachfolgedenden Erhaltungseigenschaften. Für die Experimente können Sie ein Quantensystem Ihrer Wahl verwenden, zum Beispiel jenes aus **Aufgabe 9**.

a) **Energieerwartungswert:** Der Erwartungswert für die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems, gegeben durch

$$\langle \psi_t, H\psi_t \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} \Big(-\frac{1}{2\mu}\Delta + V(x) \Big) \psi(x,t)\, \mathrm{d}x,$$

ist zeitlich konstant. Untersuchen Sie, ob die durch Ihre Algorithmen berechneten numerischen Erwartungswerte diese Eigenschaft ebenfalls besitzen.

b) **Unitatität:** überprüfen Sie, ob Ihre Algorithmen die Norm der Wellenfunktion zeitlich unverändert lassen.

c) **Zeitreversibilität:** Propagieren Sie Ihr Anfangsdatum ψ_0 vorwärts in der Zeit von $t = 0$ bis $t = T$. Verwenden Sie danach ψ_T als Anfangswert und propagieren Sie rückwärts in der Zeit bis $t = 0$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihrem ursprünglichen Anfangsdatum ψ_0.

Informationen

Die Besprechung der Aufgaben findet am **Dienstag, den 15.01.2013** statt.

Bei Fragen, der Entdeckung von Fehlern im Übungsblatt oder anderen Problemen melden Sie sich bitte per eMail bei Falko Marquardt (marquard@ma.tum.de).