

Peter Junglas

Interaktive Simulationsprogramme zur Lösung der Schrödingergleichung

Quantenmechanik für Ingenieurstudenten

Die zunehmende Miniaturisierung technischer Strukturen erreicht inzwischen Bereiche, in denen quantenmechanische Effekte eine Rolle spielen. Daher sind grundlegende Kenntnisse der Quantenmechanik auch für Elektrotechnik- oder Maschinenbau-Ingenieure wichtig. Die Vermittlung dieser Kenntnisse, z. B. im Rahmen einer Physik-Einführungsveranstaltung, hat aber einige didaktische Probleme zu überwinden: Quantenmechanik ist abstrakt und häufig unanschaulich, die verwendete Mathematik liegt weit jenseits des üblichen Ingenieurkanons. Darüberhinaus sind die meisten Lehrbücher mehr auf Anwendungen im Bereich der Physik oder Chemie ausgerichtet, in denen es vor allem um Eigenwertprobleme geht, während in den Ingenieur-Anwendungen vor allem zeitabhängige Probleme untersucht werden.

In vielen Bereichen der Physik haben sich Simulationsprogramme, etwa in Form von Java-Applets, als geeignetes Hilfsmittel zur Unterstützung der Lehre erwiesen, um durch “virtuelles Experimentieren” komplizierte Zusammenhänge zu vermitteln ([4], [2]). Im Bereich der Quantenmechanik sind solche Programme aber häufig auf eindimensionale Beispiele beschränkt [3] oder nicht wirklich interaktiv [9]. Die im Folgenden vorgestellten Programme ermöglichen dagegen die Lösung der zweidimensionalen zeitabhängigen Schrödingergleichung “in Echtzeit” (d. h. als flüssig ablaufende Animation mit variablen Parametern) und können so an Erfahrungen der Studenten bei der Simulation klassischer Wellen anknüpfen. Dies wurde neben der allgemeinen Zunahme der Rechnergeschwindigkeit vor allem durch den Einsatz neuerer numerischer Verfahren ermöglicht, die anschließend kurz skizziert werden sollen.

Die Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung beschreibt die Zeitentwicklung der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ eines Teilchens im \mathbb{R}^n in einem Potential $V(x)$ durch

$$\mathbf{H}\psi(x, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} := -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \right) + V(x).$$

Zur Vereinfachung der Notation wurden hier die Einheiten so gewählt, dass die Teilchenmasse $m = 1$ und das reduzierte Plancksche Wirkungsquant $\hbar = 1$ betragen. Die Simulationsprogramme arbeiten dagegen mit SI-Einheiten.

Für eine Vielzahl physikalisch interessanter Potentiale kann man zeigen, dass \mathbf{H} selbstadjungiert ist. In diesem Fall ist die Zeitentwicklung von ψ gegeben durch die unitäre Transformation

$$\psi(x, t) = e^{-i\mathbf{H}t}\psi(x, 0).$$

Gesucht sind nur Lösungen aus $L_2(\mathbb{R}^n)$ mit

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(x, t)|^2 d^n x = 1$$

Aufgrund der Unitarität der Zeitentwicklung bleibt die Norm von ψ zeitlich konstant. Für ein Gebiet $B \subset \mathbb{R}^n$ interpretiert man dann

$$p(B) = \int_B |\psi(x, t)|^2 d^n x$$

als die Wahrscheinlichkeit, bei Messung das Teilchen in B zu finden. Darüberhinaus wird $\|\psi\|^2$ als Verteilungsfunktion für alle Messgrößen verwendet.

Einsatz einiger Beispielapplets

Das erste Beispiel simuliert das Verhalten eines Gaußschen Wellenpakets in einem potentialfreien Kasten (s. Abb. 0.1). Anfangsort und -geschwindigkeit sowie die Breite des Wellenpakets können vorgegeben werden, angezeigt wird die zweidimensionale Verteilungsfunktion sowie der Graph von ψ längs einer Schnittlinie, wahlweise als Real- oder Imaginärteil, Betrag oder Phase. Das Applet dient vor allem dazu, Konsequenzen der Welleneigenschaften der Materie zu demonstrieren, kann aber auch gut zur Erläuterung der Heisenbergschen Unschärferelation eingesetzt werden. Dazu dienen folgende Experimente:

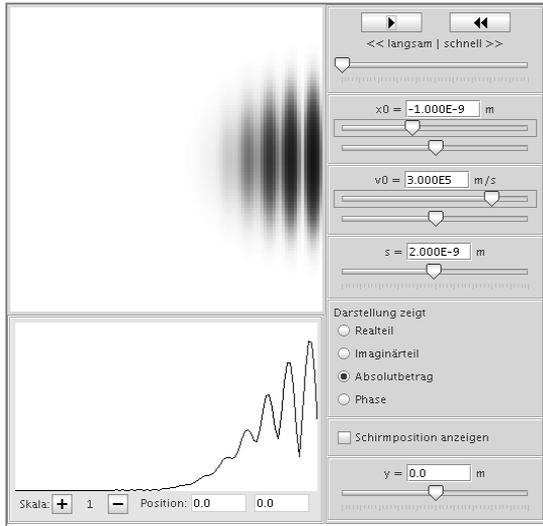


Abbildung 0.1: Freies Teilchen

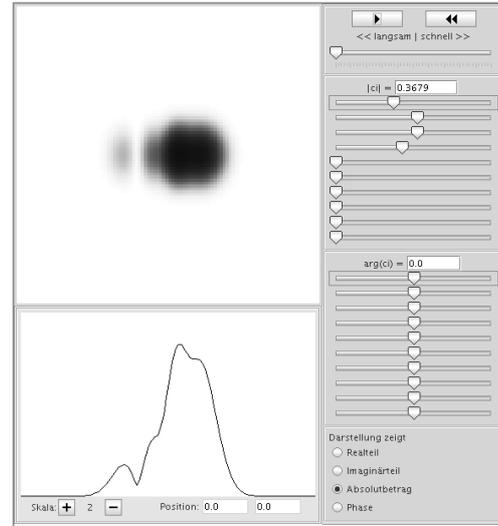


Abbildung 0.2: Oszillator

- Ausgehend von einem ruhenden Wellenpaket beobachtet man die Geschwindigkeit seines Zerfließens in Abhängigkeit von seiner Breite. Die Interpretation der Ergebnisse kann qualitativ bleiben (“ Δx klein $\rightarrow \Delta v$ groß”), aber durch geeignete Messungen auch quantifiziert werden.
- Mit den eingestellten Standardwerten läuft das Wellenpaket gegen die rechte Wand und wird dort reflektiert. Dabei treten Interferenz-Phänomene auf, die auf die Überlagerung zwischen schnellen (reflektierten) und langsamen (noch einlaufenden) Teilen der Wellenfunktion zurückgehen.

Das zweite Applet zeigt das Verhalten eines Gaußschen Wellenpakets im Potential eines radialsymmetrischen harmonischen Oszillators. Abgesehen vom Pulsieren der Breite des Pakets verläuft die Bewegung - genau wie bei einem klassischen zweidimensionalen Oszillator - in Ellipsenform bzw. (bei speziellen Anfangsbedingungen) als einfache harmonische Schwingung. Dieses Phänomen ist für Studenten - nach all den vorher erläuterten Wundern der Quantenmechanik - recht unerwartet und macht deutlich, dass man nicht alle klassischen Erwartungen über Bord werden darf. Mit geeigneten Anfangswerten kann man auch den Grundzustand des Oszillators einstellen, den man an der Konstanz von $|\psi(t, x)|^2$ bei sich linear ändernder Phase erkennt.

Das letzte Beispiel (Abb. 0.2) erlaubt die Überlagerung von Energie-Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Dazu können beliebige (komplexe) Koeffizienten für die ersten 10 x-Moden vorgegeben werden.

Mit geeigneten Anfangswerten kann man so die eindimensionalen Bewegungsformen aus dem vorigen Beispiel gut reproduzieren. Dies macht vor allem klar, wie die zeitabhängige Lösung der Schrödingergleichung und die übliche Spektralanalyse zu identischen Ergebnissen kommen.

Lösung der Schrödingergleichung

Zur numerischen Lösung diskretisiert man die Schrödingergleichung und betrachtet $\psi_{k,l}^n$ auf dem Gitterpunkt $(k\Delta x, l\Delta x)$ zur Zeit $n\Delta t$. Nähert man die Zeitentwicklung durch

$$e^{-i\mathbf{H}\Delta t} \approx \mathbf{1} - i\mathbf{H}\Delta t$$

und ersetzt die zweiten Ortsableitungen durch zentrale Differenzen

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &\rightarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} (\psi_{k+1,l}^n - 2\psi_{k,l}^n + \psi_{k-1,l}^n) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &\rightarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} (\psi_{k,l+1}^n - 2\psi_{k,l}^n + \psi_{k,l-1}^n), \end{aligned}$$

erhält man ein explizites Lösungsschema

$$\psi^{n+1} = (\mathbf{1} - i\Delta t \mathbf{H}) \psi^n.$$

Dieses Verfahren ist allerdings nur für sehr kleine Werte von Δt stabil und nicht unitär, d.h. die Norm von ψ ändert sich. Das verbreitete Crank-Nicolson-Verfahren [6] geht von der Pade-Approximation der Exponentialfunktion aus und liefert ein implizites Schema, das unitär und uneingeschränkt stabil ist. Das sich ergebende lineare Gleichungssystem ist für eine Raumdimension tridiagonal und damit gut lösbar. Bei höheren Dimensionen nimmt der Aufwand allerdings enorm zu.

Wesentlich schneller ist das von DeRaedt und Michielsen [7] verwendete Verfahren, das ausgeht von folgender Beobachtung von Suzuki [8]: Hat man eine additive Zerlegung des Hamiltonoperators, liefert die Trotter-Formel

$$e^{-i\mathbf{H}\Delta t} = e^{-i(\mathbf{H}_1+\mathbf{H}_2)\Delta t} = e^{-i\mathbf{H}_1\Delta t} e^{-i\mathbf{H}_2\Delta t} + O((\Delta t)^2)$$

Damit erhält man zunächst eine Näherung 1. Ordnung für die Zeitentwicklung

$$\mathbf{U}_1(\Delta t) := e^{-i\mathbf{H}_1\Delta t} e^{-i\mathbf{H}_2\Delta t}$$

Daraus lässt sich leicht eine Näherung 2. Ordnung

$$\mathbf{U}_2(\Delta t) := \mathbf{U}_1^T\left(\frac{1}{2}\Delta t\right) \mathbf{U}_1\left(\frac{1}{2}\Delta t\right)$$

sowie schließlich 4. Ordnung gewinnen:

$$\mathbf{U}_4(\Delta t) := \mathbf{U}_2(p\Delta t) \mathbf{U}_2(p\Delta t) \mathbf{U}_2((1 - 4p)\Delta t) \mathbf{U}_2(p\Delta t) \mathbf{U}_2(p\Delta t)$$

wobei $p = \frac{1}{4 - \sqrt[3]{4}}$.

Man diskretisiert nun zunächst \mathbf{H} in 4. Ordnung in Δx . Dann zerlegt man es geschickt in Summanden \mathbf{H}_i , für die sich jeweils die Exponentialfunktionen explizit berechnen lassen und deren Produkt das $\mathbf{U}_1(\Delta t)$ ergibt. Mit Suzuki's Formeln erhält man daraus eine Näherung in 4. Ordnung in Δt . Die Vorgehensweise bei der Zerlegung soll kurz an einem eindimensionalen Beispiel demonstriert werden: Mit Hilfe der Gitterbasisvektoren $(e_i)_k = \delta_{ik}$ kann der Zustandsvektor auf dem Gitter geschrieben werden als

$$\psi = \sum_i \psi_i e_i$$

Die zweite Ableitung liefert Anteile in \mathbf{H} der Form

$$\mathbf{H}_0 \psi = \sum_i (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) e_i$$

Definiert man Verschiebeoperatoren

$$\mathbf{R}_i e_k = \delta_{ik} e_{k+1}, \quad \mathbf{L}_i e_k = \delta_{ik} e_{k-1},$$

lautet der Operator

$$\mathbf{H}_0 = \sum_k (\mathbf{R}_k - 2 \cdot \mathbf{1} + \mathbf{L}_k)$$

Die Operatoren $\{L_k\}$ kommutieren nicht untereinander, wohl aber $\{L_{2k+1}\}$ sowie $\{L_{2k}\}$. Ausgehend von der Zerlegung

$$\sum_k \mathbf{L}_k = \sum_k \mathbf{L}_{2k} + \sum_k \mathbf{L}_{2k+1} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2$$

können die einzelnen Exponentialfaktoren damit leicht berechnet werden:

$$e^{i\mathbf{H}_1 \Delta t} = \prod_k e^{i\mathbf{L}_{2k} \Delta t}$$

Dieses Verfahren ist unitär und uneingeschränkt stabil sowie sehr genau (4. Ordnung in Δx und Δt). Außerdem ist es aber auch explizit und damit so schnell, dass seine Implementierung als Java-Applet (halbwegs) flüssige Simulationen liefert.

Ausblick

Um weitere wichtige Beispiele simulieren zu können - z. B. frei ein- und auslaufende Teilchen für Streuexperimente, Doppelspaltversuch oder Tunneleffekt -, müssen Reflexionen am Rand ausgeschaltet werden. Das erfordert statt der einfachen Dirichletschen Randbedingungen absorbierende Schichten [1] und soll in einer zukünftigen Version implementiert werden.

Die hier vorgestellten Simulationsprogramme sind im Rahmen des PhysBeans-Projekts [5] entstanden. Sie sind unter den üblichen Open-Source-Bedingungen frei verfügbar.

Literaturverzeichnis

- [1] **Antoine, X. et. al.:** *A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations.* Commun. Comput. Phys. **4**, 729-796 (2008).
- [2] **Belloni, M.; Christian. W.:** *Physlet physics.* Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River (2004).
- [3] **Belloni, M.; Christian. W.; Cox, A. J.:** *Physlet Quantum Physics.* Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River (2006).
- [4] **Junglas, P.:** *cliXX PhysBeans.* Verlag Harri Deutsch, Frankfurt (2008).
- [5] PhysBeans Homepage. <http://www.peter-junglas.de/fh/physbeans/index.html> .
- [6] **Morton, K. W. ; Mayers, D. F.:** *Numerical solution of partial differential equations.* Cambridge University Press, Cambridge (2005).
- [7] **De Raedt, H.; Michielsen, K.:** *Algorithm to solve the time-dependent schrödinger equation for a charged particle in an inhomogeneous magnetic field: Application to the aharonov-bohm effect.* Comp. Phys. **8**, 600-607 (1994).
- [8] **Suzuki, M.:** *General theory of fractal path integrals with applications to many-body theories and statistical physics.* J. Math. Phys. **22**, 400-407 (1991).
- [9] **Thaller, B.:** *Visual Quantum Mechanics.* Springer, New York (2000).

Autor

Prof. Dr. rer. nat. Peter Junglas
 Private Fachhochschule für Wirtschaft und Technik Vechta/Diepholz/Oldenburg
 Schlesierstraße 13a
 D-49356 Diepholz
 E-Mail: peter@peter-junglas.de