Rechnernutzung in der Physik

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

Prof. Dr. G. Quast, Prof. Dr. M. Steinhauser
Dr. A. Mildenberger, Dr. T. Chwalek
`http://comp.physik.kit.edu`

WS2018/19 – Blatt 03
Bearbeitungszeitraum: bis Di, 20.11.2018

Aufgabe 5: Wasserstoffatom (*)

Betrachten Sie die Radialgleichung des Wasserstoffatoms, die gegeben ist durch

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(R''(r) + \frac{2}{r}R'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r)\right) - (V(r) - E_n)R(r) = 0 \quad \text{mit } V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \ . \tag{1}$$

Bestimmen Sie die Lösung $R(r)$. Gehen Sie dabei folgendermaßen vor:

1. Drücken Sie zunächst in Gleichung (1) m und E_n durch a_0 und n aus:

   $$m = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2}\frac{1}{a_0} \qquad E_n = -\frac{e^4 m}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2}\frac{1}{n^2}\left(= \frac{-R_y}{n^2}\right)$$

   und vereinfachen Sie die erhaltene Gleichung.

2. Verwenden Sie `DSolve[]`, um die Gleichung analytisch zu lösen und vereinfachen Sie die gefundene Lösung wenn möglich.

3. In Gleichung (1) gilt $l = 0, 1, 2, \ldots$. Überzeugen Sie sich davon, dass für physikalische Lösungen n ganzzahlig und $n > l$ sein muss. Betrachten Sie dazu den Grenzfall $r \to 0$. Es ist kein Beweis gefragt, die numerische Untersuchung einiger (n, l) (z.B. für $n \leq 7, l \leq 7$) genügt.

4. Überzeugen Sie sich davon, dass die `HypergeometricU[]`-Funktion und die `LaguerreL[]`-Funktion für physikalische Werte von n und l Polynome sind, die bis auf einen r-unabhängigen Faktor identisch sind. Auch hier genügt die Betrachtung einiger (n, l) (z.B. $n \leq 7, l \leq n - 1$).

5. Aufgrund der Überlegung aus 4. kann man ohne Einschränkung eine der beiden Integrationskonstanten so wählen, dass der Anteil proportional zu `HypergeometricU[]` verschwindet. Eliminieren Sie die verbliebene Integrationskonstante, indem Sie die Wellenfunktion normieren.

6. Zeichnen Sie alle Wellenfunktionen für $n = 1, 2$.

Eventuell nützliche Funktionen: `DSolve, HypergeometricU, LaguerreL, Series`.

Aufgabe 6: Diagonalisieren von Matrizen

Gegeben sei die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 11 & 12 & 13 & 14 & 15 \\ 16 & 17 & 18 & 19 & 20 \\ 21 & 22 & 23 & 24 & 25 \end{pmatrix}.$$

(a) Berechnen Sie das charakteristische Polynom von A, ohne die in `Mathematica` eingebaute Funktion `CharacteristicPolynomial[]` zu benutzen.

(b) Überprüfen Sie den Satz von Cayley-Hamilton: Jede quadratische Matrix erfüllt ihr charakteristisches Polynom.

(c) Berechnen Sie die Matrix U, die A in eine Diagonalmatrix D überführt: $D = U^{-1}AU$, ohne die Funktionen `Eigenvectors[]`, `Eigenvalues[]` und `Eigensystem[]` zu benutzen.

(d) Überprüfen Sie Ihr Ergebnis mit Hilfe von `Eigenvectors[]` und `Eigenvalues[]`.

Hinweis: Nützliche `Mathematica`-Funktionen sind `MatrixForm[], Det[], Solve[], Transpose[], Inverse[]`.

Hinweis: Mit dem Rechnernamen `fphctssh.physik.uni-karlsruhe.de` können Sie von überall aus mittels `ssh/scp` auf einen Poolrechner zugreifen und den `Mathematica` Kernel nutzen.