Hausübung, Blatt 10

SoSe 2024

Computerübungen

Betreuer: Anas Abdelwahab

Abgabe: 20.06.2024

Falls Sie Fragen zu den Aufgaben können Sie mich per Mail erreichen (anas.abdelwahab@itp.uni-hannover.de).

Wieder gilt hier in den Aufgaben $\hbar = 1 = c$ und m = 1.

[H25] Eigenwerte eines symmetrischen 3-dimensionalen Potentialtopfes (3 Punkte)

Bestimmen Sie die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$(H\psi)(x,y,z) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x,y,z) + V(x,y,z) \,\psi(x,y,z), \tag{1}$$

wobei V das folgende rotationssymmetrische Potential in drei Dimensionen ist:

$$V(x,y,z) = \frac{11}{2} \begin{cases} x^2 + y^2 + z^2 - 3, & \text{falls } -1 < x, y, z < 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
 (2)

• Verwenden Sie den Ansatz $\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$, um die stationäre Schrödingergleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$
 (3)

in drei separate, eindimensionale Eigenwertgleichungen für die Funktionen ψ_1, ψ_2 und ψ_3 zu separieren. D.h. für jede der drei Funktionen gibt es einen Hamiltonoperator mit entsprechendem Potentialterm, dessen Eigenwerte bestimmt werden sollen.

- Erinnern Sie sich an Aufgabe [H18] und verwenden Sie die dortigen Methoden, um für die drei Gleichungen die Eigenwerte der entsprechenden Hamiltonoperators auf vier signifikante Stellen genau zu finden.
- Welche Entartung haben die Energieeigenwerte von (1)? Plotten Sie die Komponenten ψ_1, ψ_2, ψ_3 der Eigenfunktionen zu den gefundenen Eigenwerten.

[H26] Eigenwerte eines nicht-symmetrischen 3-dimensionalen Potentialtopfes (7 Punkte)

Gegeben sei nun folgendes Potential ohne Rotationssymmetrie:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} \frac{1}{5}(x^2 - 1) + \frac{41}{14}(y^2 - 1) + \frac{229}{18}(z^2 - 1), & \text{falls } -1 < x, y, z < 1\\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
(4)

- Verwenden Sie analog zur Aufgabe [H25] den Ansatz $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$, um die dazugehörige Schrödingergleichung zu separieren.
- Bestimmen Sie anschließend die Eigenwerte des Hamiltonoperators (1) mit dem Potential (4) mit Hilfe der numerischen Methoden aus Aufgabe [H18].
- Kommentieren Sie die Entartung der Eigenwerte. Plotten Sie die Komponenten ψ_1, ψ_2, ψ_3 der Eigenfunktionen zu den gefundenen Eigenwerten.