

Betreuer: Leander Fiedler

Falls Sie Fragen zu den Aufgaben oder Probleme mit Mathematica haben können Sie mich per Mail erreichen (leander.fiedler@itp.uni-hannover.de) oder am Mittwoch, den 01.07.2015, in meinem Büro zwischen 14 und 16 Uhr. Bitte benennen Sie die Dateien, die Sie im StudIP hochladen, nach folgendem Schema: #Übungsgruppe_#CÜ_Name.pdf/nb. Ansonsten gelten die Bemerkungen, die auf dem Blatt der ersten Computerübung stehen. Wieder gilt hier in den Aufgaben $\hbar = 1 = c$ und $m = \frac{1}{2}$.

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

Bestimmen Sie die Eigenwerte des Hamiltonoperators

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

wobei V das folgende Potential in drei Dimensionen ist:

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

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

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

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-rotationssymmetrischen Potentialtopfes (7 Punkte)

Gegeben sei nun folgendes, nicht-rotationssymmetrisches Potential:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \frac{2}{3}(x^2 - 1) + \frac{41}{7}(y^2 - 1) + \frac{229}{9}(z^2 - 1), & \text{falls } x^2 + y^2 + z^2 < 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (4)$$

- 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) mithilfe 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.