Einführung in die Quantentheorie

Hausübung, Blatt 10 SoSe 2018 Abgabe: 26.06.2018

Computerübungen

Betreuer: Gleb Zhilin

Falls Sie Fragen zu den Aufgaben oder Probleme mit Mathematica haben, können Sie mich per Mail erreichen (`zhilin@math.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:

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

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

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

  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:

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

- 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.