Institut für Theoretische Physik

COMPUTERPRAKTIKUM

4. PRAKTIKUMS-AUFGABE

Teilchen im Potenzialkasten mit unendlich hohen Wänden

1. Stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung für das eindimensionale Problem auf und finden Sie die normierten Wellenfunktionen für $n = 1, 2, 3, 4$!

$$V = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0 \\ 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{für } x > L \end{cases} \qquad \text{Randbedingung: } \Psi(0) = \Psi(L) = 0$$

   Stellen Sie die entsprechenden Lösungen für $n = 1, 2, 3, 4$ graphisch dar!

2. Berechnen Sie die stationären Teilchenenergien im Potenzialkasten aus Aufgabe 1. Interpretieren Sie das Erbebnis mit Blick auf ein freies Teilchen physikalisch! Berechnen Sie für die verschiedenen Zustände die mittlere Teilchenposition $\langle x \rangle$ sowie den mittleren Teilchenimpuls $\langle p_x \rangle$!

3. Ein Elektron befindet sich in einem Molekül der Länge $L = 1$ nm. Wie groß ist in der Näherung des unendlich tiefen Potenzialtopfes seine Grundzustandsenergie und seine kleinste Anregungsenergie? Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P dafür, das Elektron im Grundzustand zwischen $x = 0$ nm und $x = 0.2$ nm zu finden?

4. Geben Sie einen ungefähren Wert für die Kernanregungsenergie an, indem Sie die erste Anregungsenergie eines Protons berechnen, das sich in einem Atomkern mit einem Durchmesser von 10^{-14} m befindet. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P dafür, das Proton im Grundzustand zwischen $x = 0.25\ L$ und $x = 0.75\ L$ anzutreffen? Überlegen Sie, welche Rolle die Dimension dabei spielt!

5. **Überlegen** Sie, wie die Wellenfunktion für ein Teilchen aussieht, das sich in einem zweidimensionalen (dreidimensionalen) Kasten unendlicher Tiefe befindet? Wie groß ist der Entartungsgrad der Zustände eines derart 'gefangenen' Teilchens (qualitative Betrachtung)?

Hinweise zur Durchführung:

- Nutzen Sie bei der Bearbeitung von Aufgabe 1 die Möglichkeit, globale Annahmen (`$Assumptions`) für auftretende Variable zu definieren!
- Machen Sie sich bei der Bearbeitung von Aufgabe 2 mit der `Prefix` Form vertraut! Diese Form der Syntax `Q@psi` ist vorallem dann sinnvoll, wenn `Q` als Operator aufgefasst werden soll, der auf die Funktion `psi` wirkt.

Definieren Sie auf diese Weise zum Beispiel den Hamiltonoperator, dem ein variables Potenzial V übergeben werden kann und den Impulsoperator für den eindimensionalen Fall!

Beispiel: Definition des Operators `Q` als Differenzialoperator für die n-te Ableitung:

```
In[1] := Q[n_] @ psi_ := D[psi,{x,n}]
In[2] := Q[2] @ (x^2)
Out[2] = 2
```

- Nutzen Sie bei der Bearbeitung von Aufgabe 3 und 4 die Mathematica-Pakete “PhysicalConstants‘ “ und “Units‘ “ und machen Sie sich mit der Verwendung von physikalischen Konstanten wie ElectronMass, PlanckConstantReduced und den Einheiten wie Meter, Kilogramm, ElectronVolt vertraut!