

Angaben zur 3. Übung am 21./22.3.2017

Beispiel

Finden Sie den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand des 1-dimensionalen Wasserstoffatoms. Testen Sie Ihr Programm für die beiden Potentiale

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{2+x^2}} \quad (1)$$

und

$$V(x) = -\frac{1}{1+|x|}. \quad (2)$$

Finden Sie zudem die Bindungsenergien E_0 und E_1 dieser Zustände.

Vorgangsweise:

1. Überlegen Sie sich eine „vernünftige“ Systemgröße und passende Schrittweite Δx .
2. Stellen Sie die Hamiltonmatrix des Systems auf. Verwenden Sie atomare Einheiten $e = m_e = \hbar = 1$.
3. Propagieren Sie das System in negativer komplexer Zeit (Methode? Abbruchbedingung?)

Vergleichen Sie graphisch den Grundzustand von Potential (2) mit der analytischen Lösung $\phi_0(x) = \sqrt{2/5} \exp(-|x|)(1+|x|)$ und ermitteln Sie die Impulsverteilung $\tilde{\phi}_0(p)$. Verwenden Sie dazu eine Bibliotheksroutine aus der `cernlib` (ist auf dem Übungsserver installiert; vergessen Sie nicht, die Bibliothek zu verlinken! Informationen zu den einzelnen Funktionen finden Sie unter <http://concord.itp.tuwien.ac.at/cernlib>). Vergleichen Sie mit der Impulsverteilung des „echten“ Wasserstoffatoms

$$\tilde{\phi}_0(p) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{(1+p^2)^2}.$$

Stellen Sie auch die Grundzustandsfunktion im Impulsraum graphisch dar (Achsen!).

Anleitung

Während der Übung ist ein kurzes Protokoll anzufertigen und als `PROTOKOLL.txt` im Verzeichnis des jeweiligen Übungstages abzuspeichern.

Das Protokoll ist eine einfache ASCII-Text-Datei, die mit einem Text-Editor mit dem Sie auch Ihre Programme schreiben, erstellt wird. Nennen Sie diese Datei unbedingt `PROTOKOLL.txt`.

Das Protokoll muss folgendes enthalten:

1. Datum, Übungsnummer, Gruppennummer, Name(n) der mitwirkenden StudentInnen

2. Benötigter Zeitaufwand für die gestellten Aufgaben (circa)
3. Namen der erstellten Programme (KEINE Listings). Die erstellten Dateien müssen sich ebenfalls im oben genannten Verzeichnis befinden.
4. Kurze Antwort auf eventuell weiter unten gestellte Fragen bzw. Namen von Bild-dateien, in denen Sie Ihre Ergebnisse dargestellt haben.
5. Eventuelle Probleme oder Besonderheiten, falls diese aufgetreten sind.