

# Angaben zur 4. Übung am 28./29.3.2017

## Beispiel

### Propagation eines Wellenpaketes:

Lösen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung (verwenden Sie atomare Einheiten:  $e = m_e = \hbar = 1$ ) für ein Gauss'sches Wellenpaket mit Impuls  $k_0 = 1$  a.u., das auf eine Potentialbarriere trifft.

### Anleitung:

- Stellen Sie den Hamiltonoperator auf. Die Höhe der Potentialbarriere sei  $V_0 = 2$  a.u., ihre Breite  $L = 5$  a.u.
- Starten Sie mit einem Wellenpaket  $|\psi(x, t = 0)\rangle \propto \exp(-x^2/2\sigma^2) \exp(ik_0x)$  für  $\sigma = 1$  und Impuls  $k_0 = 1$  a.u.
- Schreiben Sie für die Zeitpropagation eine Crank-Nicolson-Routine (Achtung: ähnlich kleine Zeitschritte wie beim Eulerverfahren wählen!).

### Aufgaben:

1. Bestimmen Sie den Transmissionskoeffizienten für das Wellenpaket
2. Berechnen Sie in regelmässigen Abständen das Wellenpaket im Impulsraum.

## Anleitung

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

z.B. `~/03Ue2015-03-11/PROTOKOLL.txt`

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
5. Eventuelle Probleme oder Besonderheiten, falls diese aufgetreten sind.