Dozent: Prof. Dr. Roland Mitric

Ausgabe: 04.06.2013 Abgabe:

Teilchen im Kasten

1. Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Potentialtopf mit endlich hohen Wänden lautet:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{für } x < -a \\ B^+ \cos(\lambda x) + B^- \sin(\lambda x) & \text{für } -a \leq x \leq a \\ Ce^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases}$$

In der Vorlesung haben Sie die geraden Wellenfunktionen $\psi(x) = \psi(-x)$ betrachtet und die Grundzustandsenergie mit Hilfe des Bisektionsverfahrens numerisch bestimmt.

a) Leiten Sie nun die Energiegleichung für die ungerade Wellenfunktion ($\psi(x) = -\psi(-x)$) her.

b) Lösen Sie die in (a) erhaltene nichtlineare Gleichung mit Hilfe des Bisektionsalgorithmus und berechnen Sie alle Zustandsenergien für gerade und ungerade Zustände.

c) Zeichnen Sie ein Energieniveau-Diagramm aus den erhaltenen Werten.

(10 Punkte)

Newton-Raphson-Verfahren

2. Das Bindungspotential von NaCl ist näherungsweise durch

$$V(r) = -\frac{\beta^2}{r} + \alpha \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

beschrieben, wobei $\beta^2 = 1.44$ eV·nm, $\alpha = 1090$ eV und $\rho = 0.033$ nm.

a) Bilden Sie die erste Ableitung von $V(r)$ und stellen Sie das Potential und die erste Ableitung graphisch dar.

b) Minimieren Sie die Funktion $V(r)$ (i) mit dem Newton-Raphson-Verfahren und (ii) mit dem Bisektionsalgorithmus und bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand r_0.
Hinweis: Lösen Sie dazu die Gleichung $\frac{dV(r)}{dr} = 0$.

c) Vergleichen Sie das Konvergenzverhalten beider Methoden.

(5 Punkte)