

# Informatik für Nanowissenschaftler

## Projekt A2: Periodische Abfolge von Potentialtöpfen

---

Jan Kowalczyk und Rasmus Curt Raschke

Universität Hamburg  
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften  
Department Physik

15. Februar 2023



# Gliederung

---

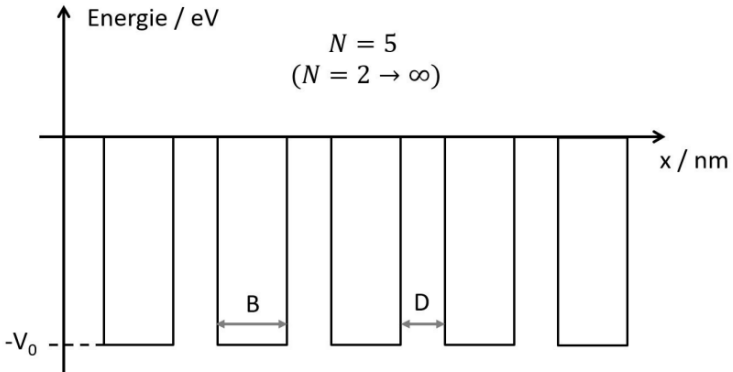
- 1 Theorie
- 2 Programmierung
- 3 Auswertung
- 4 (Methodik der Vorlesung)

# Theorie

---

- 1 Theorie
  - Physikalisches Problem
  - Methodik
- 2 Programmierung
- 3 Auswertung
- 4 (Methodik der Vorlesung)

# Physikalisches Problem



Endliche Abfolge von  $N$  Potentialtöpfen.

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände



# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
  - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL

# Methodik

---

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
  - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
  - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen

# Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
  - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
  - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
  - *Newton-Raphson* präzisiert

# Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
  - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
  - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
  - *Newton-Raphson* präzisiert
- → Konvergenzverfahren

# Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
  - SGL mit zeitinvariantem Potential
  - Separation der Variablen
  - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
  - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
  - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
  - *Newton-Raphson* präzisiert
- → Konvergenzverfahren
- I/O durch GUI

# Programmierung

---

1 Theorie

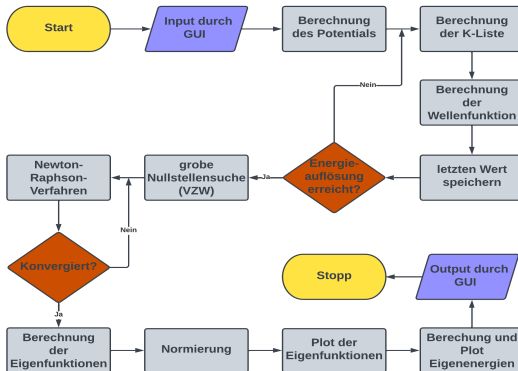
2 **Programmierung**

- Programmarchitektur
- GUI

3 Auswertung

4 (Methodik der Vorlesung)

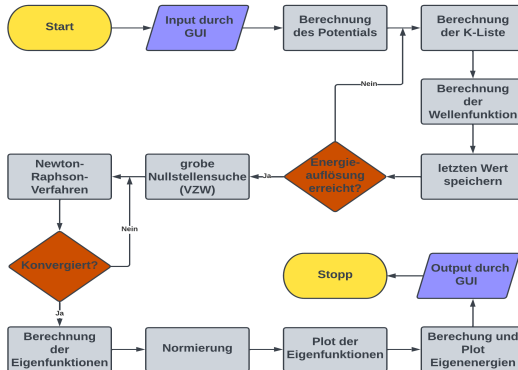
# Programmarchitektur



- numerischer Teil mit *NumPy*-Docstrings versehen



# Programmarchitektur



- numerischer Teil mit *NumPy*-Docstrings versehen
- Versionskontrolle mit Git/GitHub

# GUI

---

- ① Grundaufbau
- ② Schwierigkeiten
- ③ Lösungen
- ④ Code

# GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

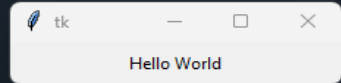
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



- Window

# GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

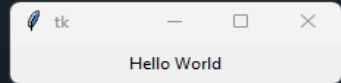
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



- Window
- Labels

# GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

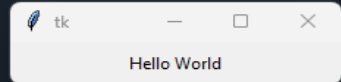
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

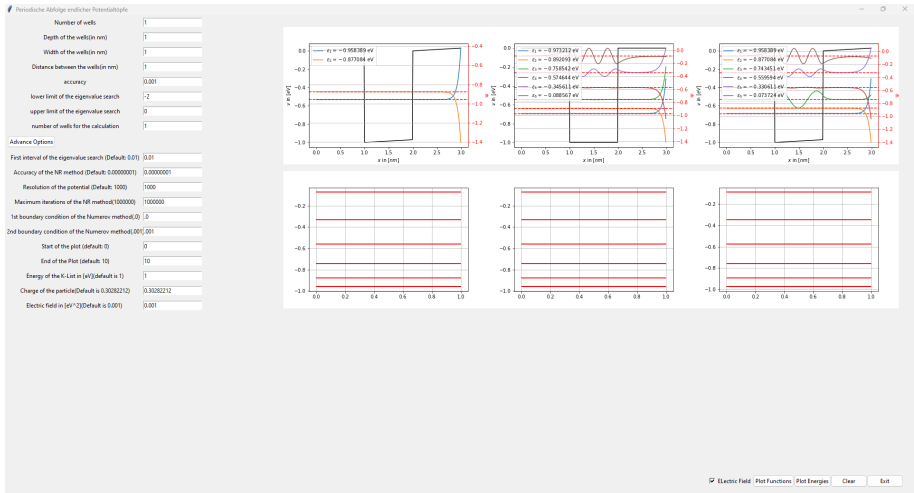
frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



- Window
- Labels
- Knöpfe

# GUI: Grundaufbau



# GUI: Schwierigkeiten

---

- Entwickleroptionen

# GUI: Schwierigkeiten

---

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen



# GUI: Schwierigkeiten

---

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen

# GUI: Schwierigkeiten

---

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:

# GUI: Schwierigkeiten

---

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
  - durch Knopfdruck und Variable veränderbar

# GUI: Schwierigkeiten

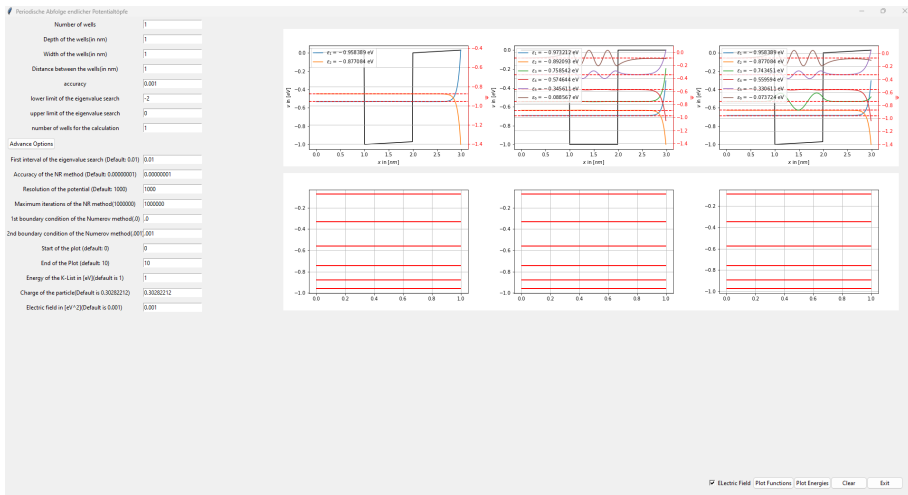
---

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
  - durch Knopfdruck und Variable veränderbar
  - Variablen manuell definieren

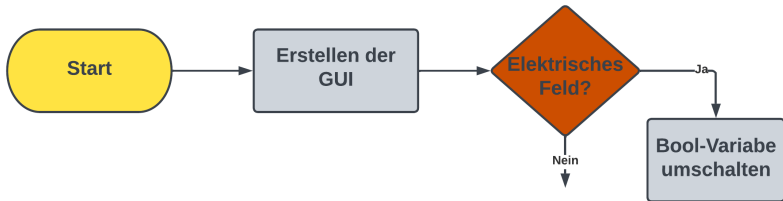
# GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
  - durch Knopfdruck und Variable veränderbar
  - Variablen manuell definieren
  - Graphen nicht anreihen, sondern platzieren

## GUI

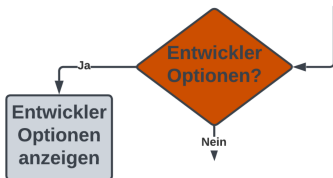


# GUI: Architektur



Entscheidung über E-Feld

# GUI: Architektur



Periodische Abfolge endlicher Potentialtöpfe

Number of wells

Depth of the wells(in nm)

Width of the wells(in nm)

Distance between the wells(in nm)

accuracy

lower limit of the eigenvalue search

upper limit of the eigenvalue search

number of wells for the calculation

Advance Options

Periodische Abfolge endlicher Potentialtöpfe

Number of wells

Depth of the wells(in nm)

Width of the wells(in nm)

Distance between the wells(in nm)

accuracy

lower limit of the eigenvalue search

upper limit of the eigenvalue search

number of wells for the calculation

Advance Options

First interval of the eigenvalue search (Default: 0.01)

Accuracy of the NR method (Default: 0.00000001)

Resolution of the potential (Default: 1000)

Maximum iterations of the NR method(1000000)

1st boundary condition of the Numerov method(0)

2nd boundary condition of the Numerov method(.001)

Start of the plot (default: 0)

End of the Plot (default: 10)

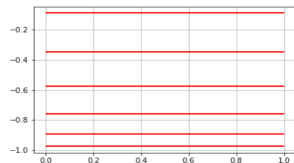
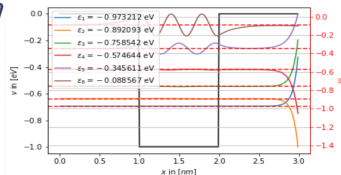
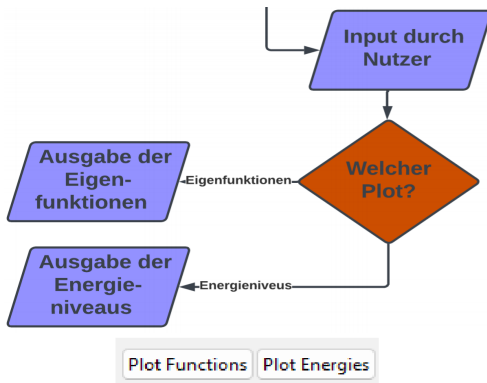
Energy of the K-List in [eV](default is 1)

Charge of the particle(Default is 0.30282212)

Electric field in [eV^2](Default is 0.001)

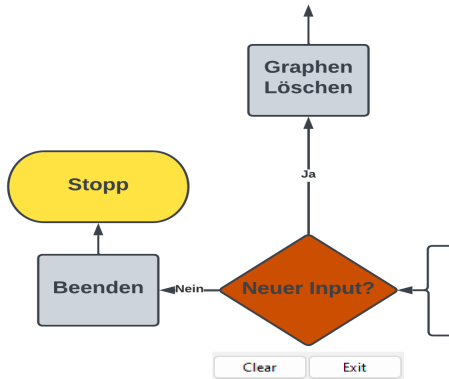


# GUI: Architektur



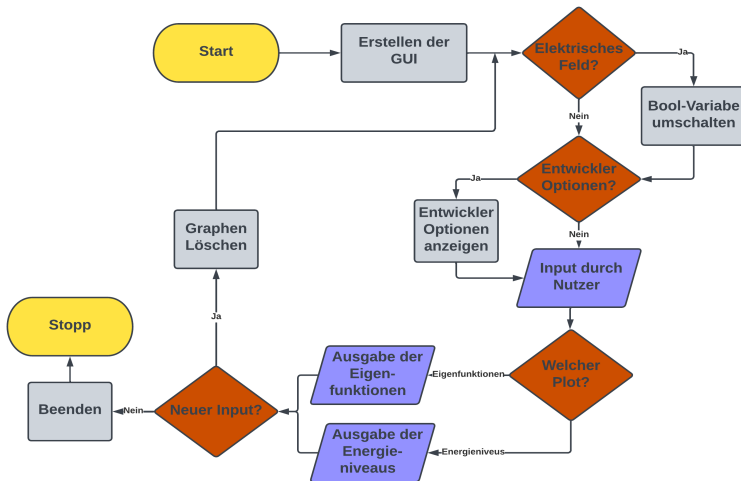
Energien oder Funktionen

# GUI: Architektur

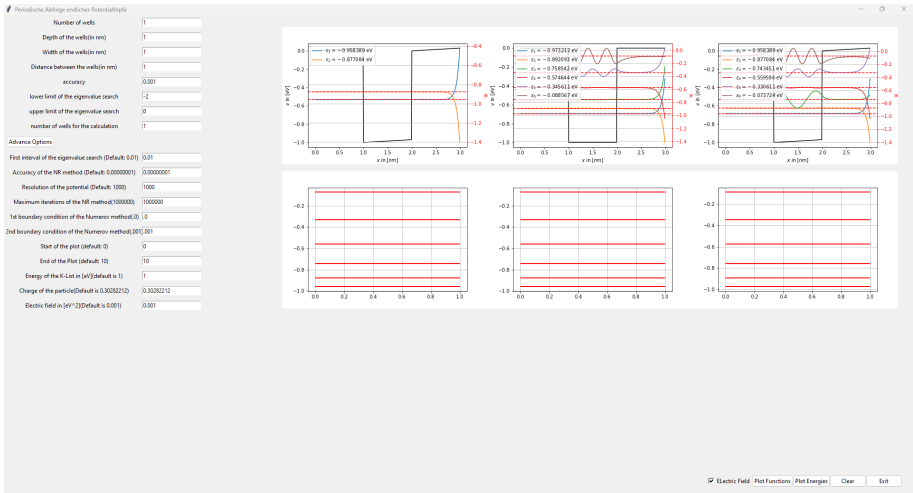


Beenden oder weitere Inputs

# GUI: Architektur



# GUI: Architektur



# Auswertung

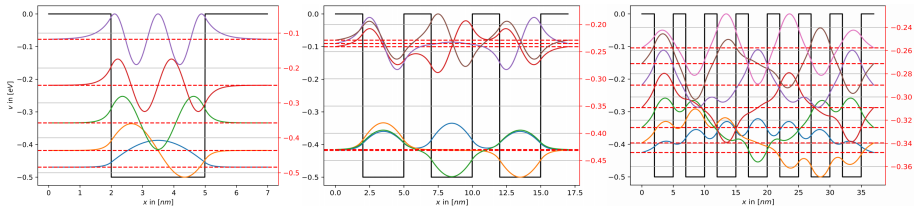
## 1 Theorie

## 2 Programmierung

## 3 Auswertung

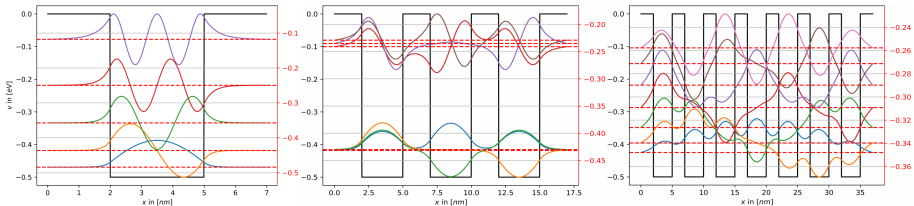
- Einteilung der Wellenfunktion
- Übergang zu zwei Kästen
- Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle
- Das *Bloch*-Theorem
- *Kronig-Penney*-Modell
- Austauschwechselwirkung
- Elektrische Felder
- Literatur

# Einteilung der Wellenfunktion



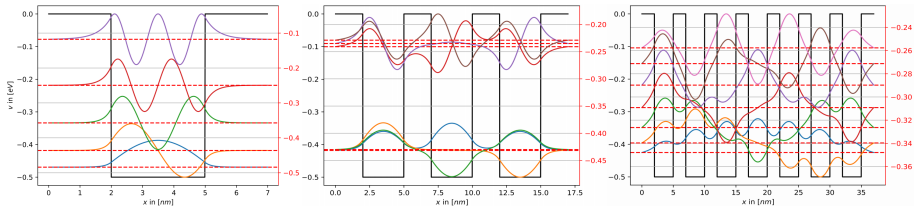
- Wfn. entsprechend Kastenanzahl  $n$  charakterisierbar:

# Einteilung der Wellenfunktion



- Wfn. entsprechend Kastenanzahl  $n$  charakterisierbar:
  - $n = 1$ : Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes

# Einteilung der Wellenfunktion

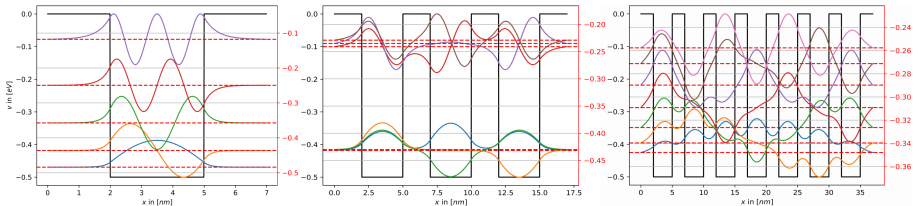


- Wfn. entsprechend Kastenanzahl  $n$  charakterisierbar:

- $n = 1$ : Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes
- $1 < n < 7$ : Aufspaltung in Bänder

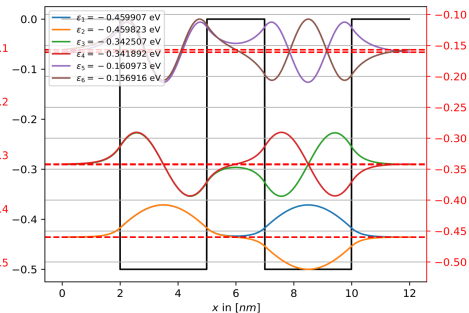
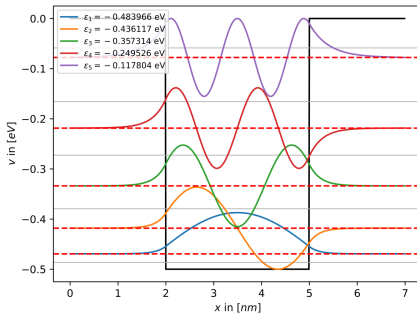


# Einteilung der Wellenfunktion



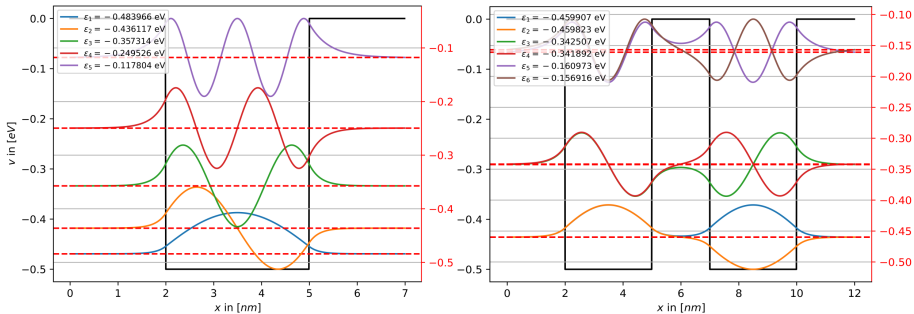
- Wfn. entsprechend Kastenanzahl  $n$  charakterisierbar:
  - $n = 1$ : Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes
  - $1 < n < 7$ : Aufspaltung in Bänder
  - $6 < n$ : Wfn. spürt Potentiale nicht mehr effektiv → Fall 1 mit Störung

# Übergang zu zwei Kästen



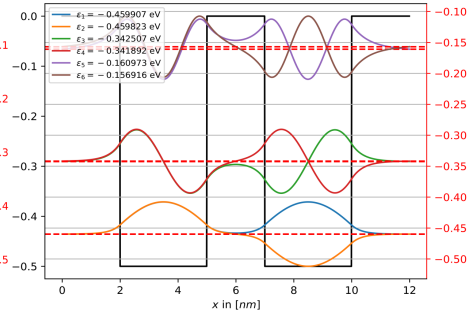
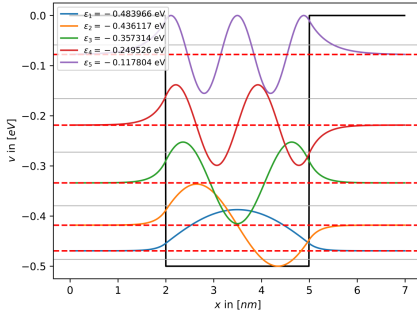
- Eigenenergien  $\propto \frac{1}{L^2}$

# Übergang zu zwei Kästen



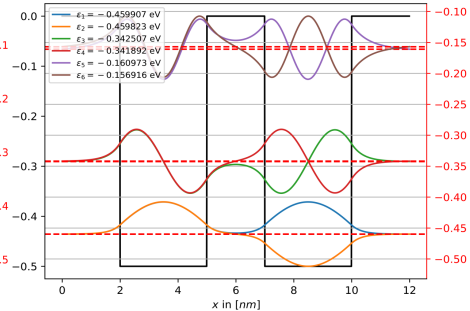
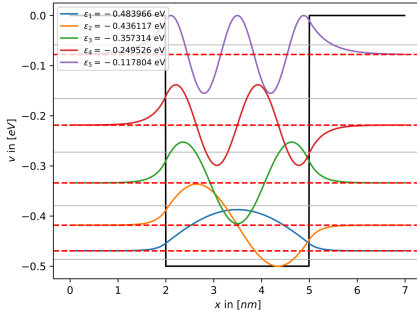
- Eigenenergien  $\propto \frac{1}{L^2}$
- Bandstrukturen erkennbar

# Übergang zu zwei Kästen



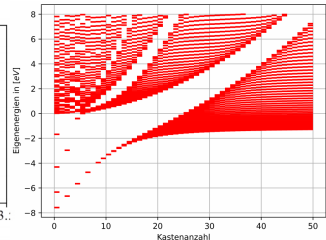
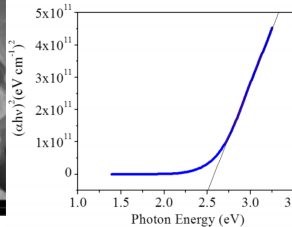
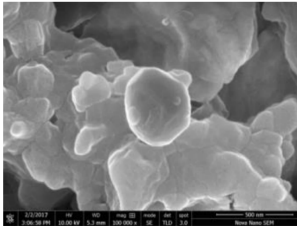
- Eigenenergien  $\propto \frac{1}{L^2}$
- Bandstrukturen erkennbar
- Band-Wfn. Linearkombination des einfachen Kastens

# Übergang zu zwei Kästen



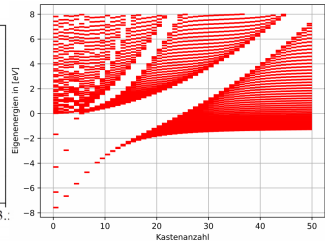
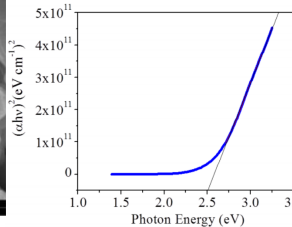
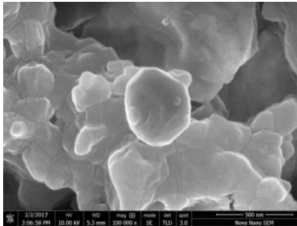
- Eigenenergien  $\propto \frac{1}{L^2}$
- Bandstrukturen erkennbar
- Band-Wfn. Linearkombination des einfachen Kastens
- Knotenanzahl invariant gegenüber  $n$

# Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



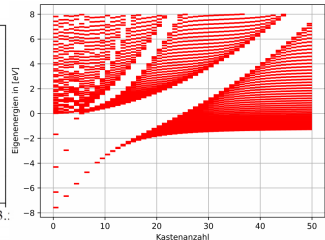
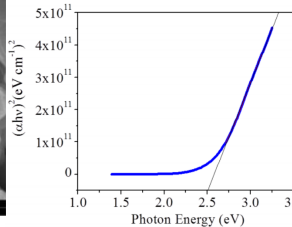
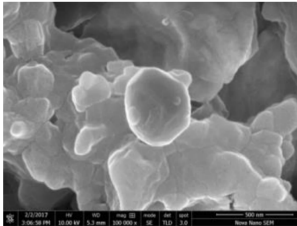
- Simulation der Bandlücke erfolgreich

# Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar

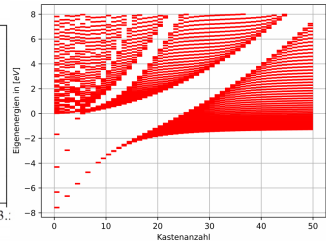
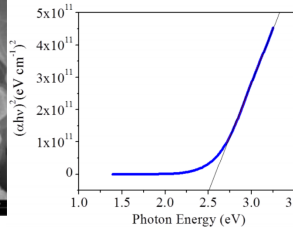
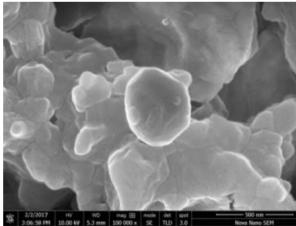
# Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$

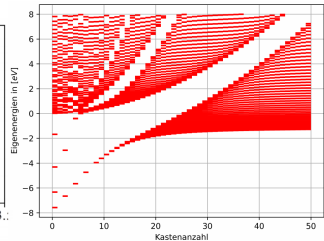
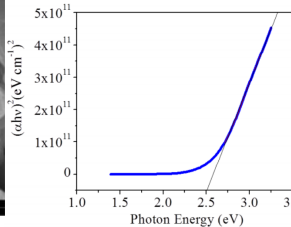
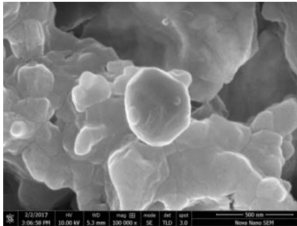


# Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$
- $E_{\text{theo}} = 2.63 \text{ eV}$  für  $n = 10$

# Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$
- $E_{\text{theo}} = 2.63 \text{ eV}$  für  $n = 10$
- $\Delta E_{\%} = 5\%$

# Das *Bloch*-Theorem

## Definition: periodisches Gitter, gitterperiodische Funktion

Es sei:

$$V(x) = V(x + a) \quad (1)$$

Dann ist:

$$u(x) = u(x + a) \quad (2)$$

eine zugehörige gitterperiodische Funktion.

# Das *Bloch*-Theorem

## Definition: periodisches Gitter, gitterperiodische Funktion

Es sei:

$$V(x) = V(x + a) \quad (1)$$

Dann ist:

$$u(x) = u(x + a) \quad (2)$$

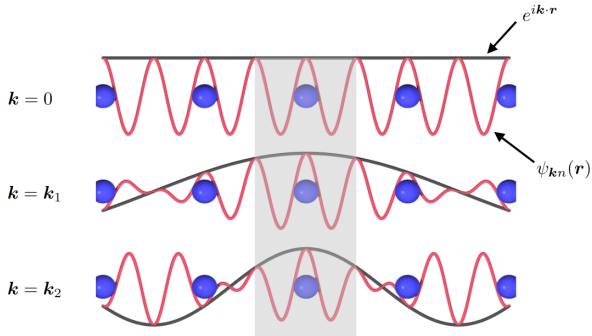
eine zugehörige gitterperiodische Funktion.

## Satz: *Bloch*-Theorem

Die Basis der Eigenzustände von Kristallelektronen ist gegeben durch:

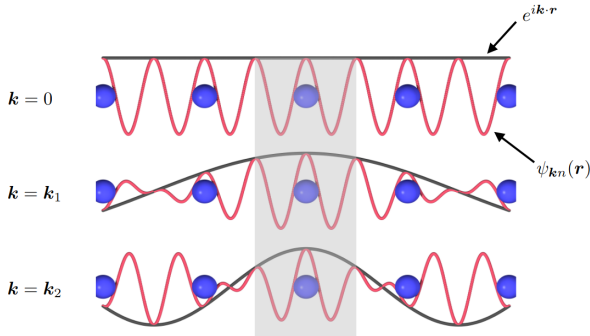
$$\psi_k(x) = \exp(ikx) u_k(x) \quad (3)$$

# Kronig-Penney-Modell



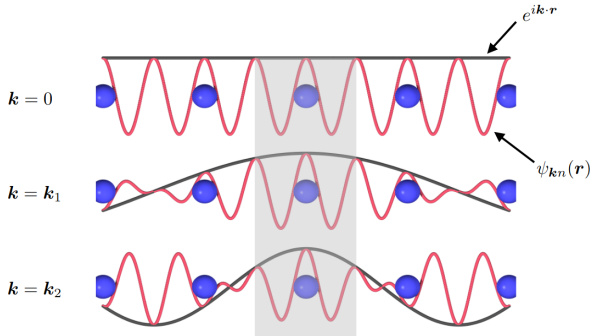
- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell

# Kronig-Penney-Modell



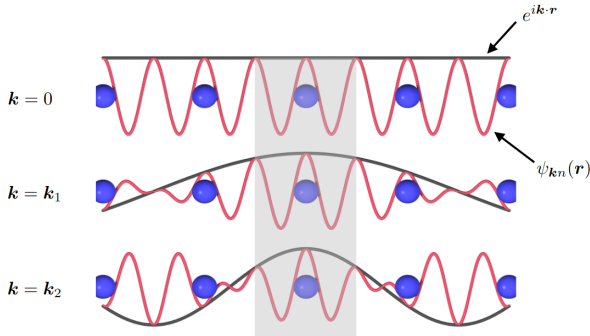
- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale

# Kronig-Penney-Modell



- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale
- vernachlässigt *Fermi-Dirac*-Statistik

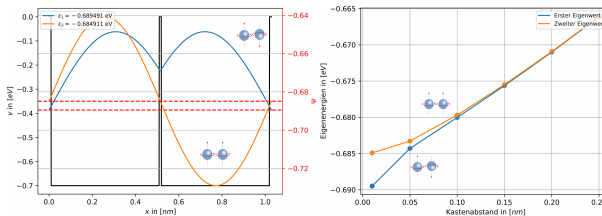
# Kronig-Penney-Modell



- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale
- vernachlässigt *Fermi-Dirac*-Statistik
- gut geeignet z.B. für *Quantum Dots*

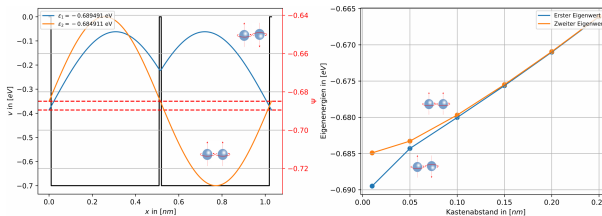


# Austauschwechselwirkung



$$\bullet \Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$$

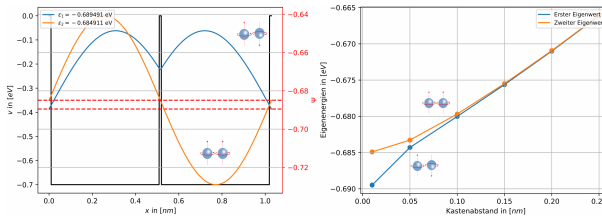
# Austauschwechselwirkung



- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$

- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$

# Austauschwechselwirkung

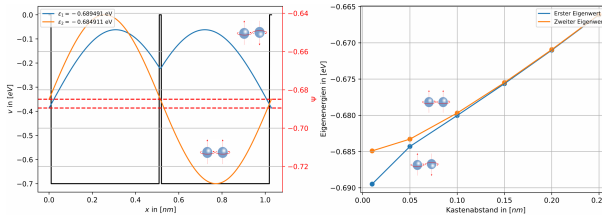


- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$

- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$

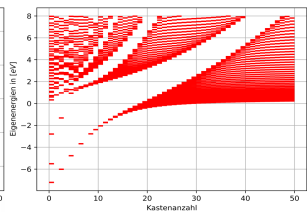
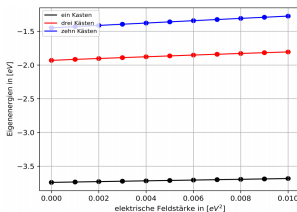
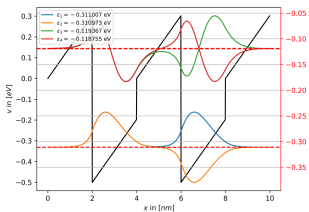
- $\epsilon_2 \sim |\uparrow\uparrow\rangle$

# Austauschwechselwirkung



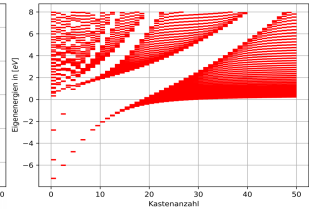
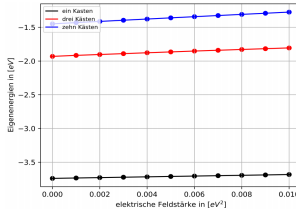
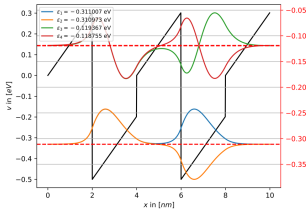
- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$
- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$
- $\epsilon_2 \sim |\uparrow\uparrow\rangle$
- antiferromagnetische Wechselwirkung

# Elektrische Felder



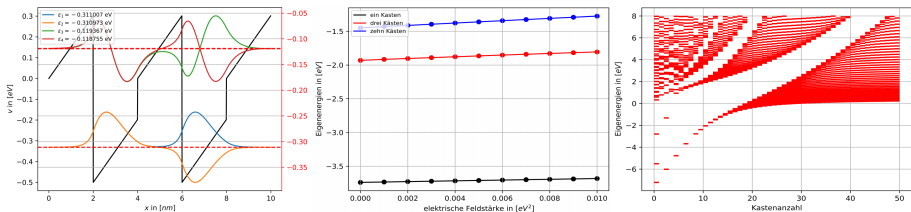
- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf

# Elektrische Felder



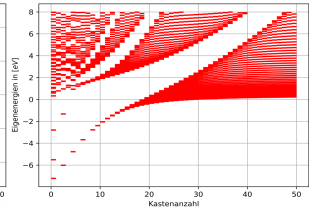
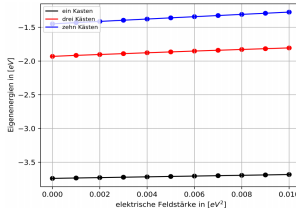
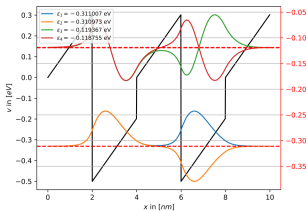
- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt

# Elektrische Felder



- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt
- Eigenwerte steigen mit Feldstärke





# Elektrische Felder



- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt
- Eigenwerte steigen mit Feldstärke
- Valenzband insgesamt angehoben, Bandlücke identisch



# Literatur I

-  DAVIES, JOHN H.: *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*.  
Cambridge University Press, New York, 1. Auflage , 2005.
-  FLÜGGE, SIEGFRIED: *Rechenmethoden der Quantentheorie*.  
Springer, Berlin [u. a.], 6. Auflage , 1999.
-  KHALID, M. ET AL.: *Structural, morphological and optical investigation of silver nanoparticles synthesized by sol-gel auto-combustion method*.  
Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures, 13(3):679–683, 2018.
-  LANDAU, RUBIN H. UND PÁEZ, MANUEL J. UND BORDEIANU CRISTIAN C.: *Computational Physics*.  
Wiley-VCH, Weinheim, 3. Auflage , 2015.

# Literatur II

---



LUTZ, M.: *Programming Python*.

O'Reilly, Sebastopol, 4. Auflage , 2011.



MAYER-KUCKUK, T.: *Atomphysik*.

Springer, Wiesbaden, 5. Auflage , 1997.

# (Methodik der Vorlesung)

---

1 Theorie

2 Programmierung

3 Auswertung

- 4 (Methodik der Vorlesung)
- Schrödingergleichung
  - Numerik
  - Darstellung
  - Einfluss der Kastenbreite

# Schrödingergleichung

Definition: Allgemeine Form der SGL

$$i\hbar\psi(r, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r, t) \right\} \psi(r, t). \quad (4)$$

# Schrödingergleichung

## Definition: Allgemeine Form der SGL

$$i\hbar\psi(r, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r, t) \right\} \psi(r, t). \quad (4)$$

## Satz: Separabilität der SGL

Sei  $V(r, t) \equiv V(x)$ , dann:

$$\psi(x, t) = u(x) \cdot f(t) \quad (5)$$

# Schrödingergleichung

## Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung

# Schrödingergleichung

## Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- $k$  hat Form einer Wellenzahl  $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$

# Schrödingergleichung

## Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- $k$  hat Form einer Wellenzahl  $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$
- für kinetische Energie gilt  $T = \frac{p^2}{2m_e}$



# Schrödingergleichung

## Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- $k$  hat Form einer Wellenzahl  $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$
- für kinetische Energie gilt  $T = \frac{p^2}{2m_e}$
- mit  $\frac{p^2}{2m_e} = C - V_0$  folgt  $C = T + V_0 = E$

# Numerik

## Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite  $h$  ist  $i$ -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung

# Numerik

## Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite  $h$  ist  $i$ -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte  $u_0$  und  $u_1$  müssen gegeben sein

# Numerik

## Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite  $h$  ist  $i$ -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte  $u_0$  und  $u_1$  müssen gegeben sein
- K-Liste muss errechnet werden  $\rightarrow$  externes Potential

# Numerik

## Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite  $h$  ist  $i$ -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte  $u_0$  und  $u_1$  müssen gegeben sein
- K-Liste muss errechnet werden  $\rightarrow$  externes Potential
- rechtssetigen Randwert durch Nullstellensuche in  $u$  erzwingen  
 $\rightarrow$  Schießverfahren

# Numerik

## Definition: Newton-Raphson-Verfahren

Die  $i$ -te Iteration ist gegeben durch:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{u(x_{n-1})}{u'(x_{n-1})} \quad (9)$$

mit dem Differenzenquotienten:

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (10)$$

- ermöglicht hochgenaue Nullstellensuche

# Numerik

## Definition: Newton-Raphson-Verfahren

Die  $i$ -te Iteration ist gegeben durch:

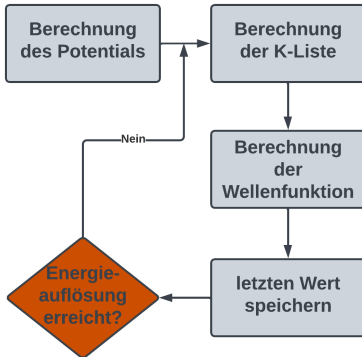
$$x_n = x_{n-1} - \frac{u(x_{n-1})}{u'(x_{n-1})} \quad (9)$$

mit dem Differenzenquotienten:

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (10)$$

- ermöglicht hochgenaue Nullstellensuche
- braucht vorgeschaltete grobe Nullstellensuche

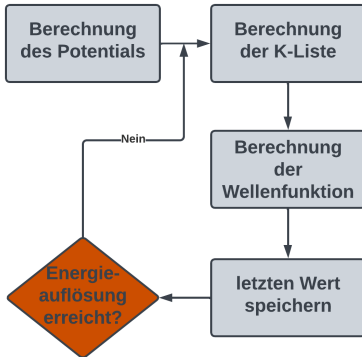
# Numerik



- Potential automatisch symmetrisiert

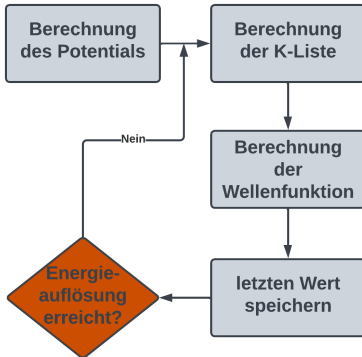


# Numerik



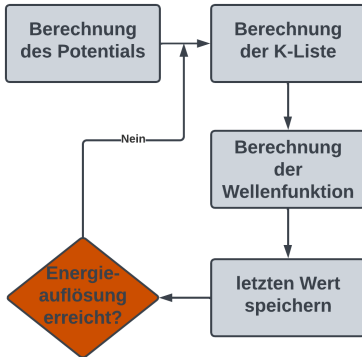
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung

# Numerik



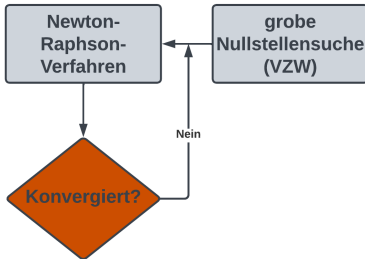
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung
- Wfn. für E-Spektrum errechnen

# Numerik



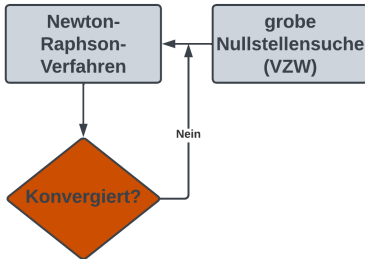
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung
- Wfn. für E-Spektrum errechnen
- rechten Randwert speichern

# Numerik



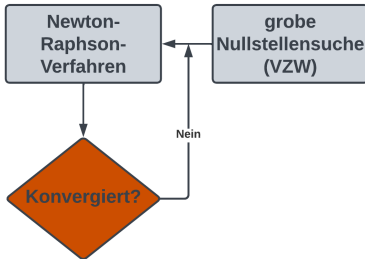
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode

# Numerik



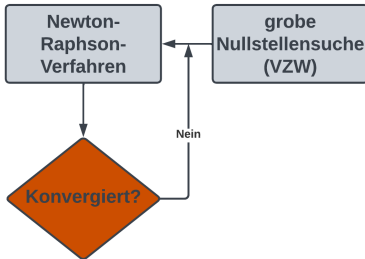
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen

# Numerik



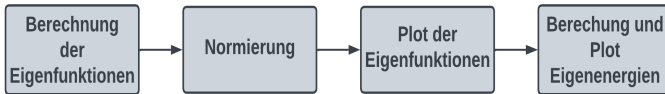
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen
- Konvergenzbedingung: Differenz der Iterationen

# Numerik



- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen
- Konvergenzbedingung: Differenz der Iterationen
- Genauigkeiten der Methoden getrennt

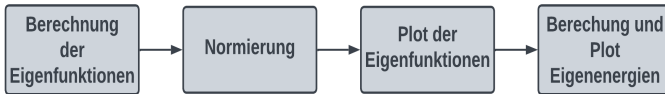
# Darstellung



- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten

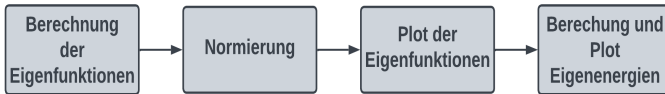


# Darstellung



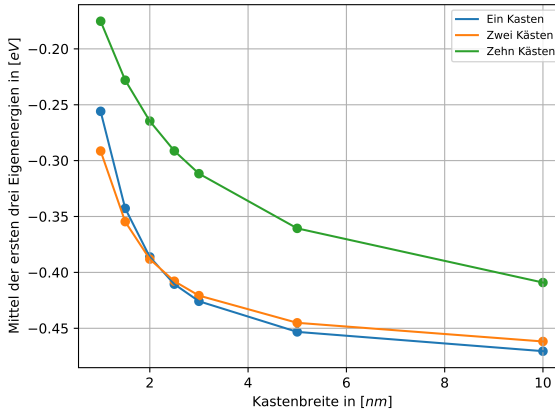
- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten
- Bandstruktur errechnen

# Darstellung



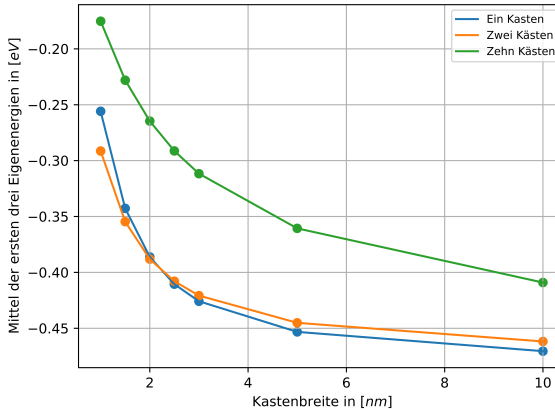
- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten
- Bandstruktur errechnen
- numerisch sehr aufwendig

# Einfluss der Kastenbreite



- Eigenenergien sinken mit Kastenbreite

# Einfluss der Kastenbreite



- Eigenenergien sinken mit Kastenbreite
- Abnahme  $\propto \frac{1}{L^2}$