

# Angaben zur 6. Übung am 24./25.4.2018

## Beispiele

### Laplacegleichung:

Berechnen Sie das Potential im Inneren eines Quadrats mit Seitenlänge 15 cm in dessen Zentrum ein weiteres Quadrat mit Seitenlänge 5 cm liegt. Am inneren Quadrat liegen 1000 V an, das äussere Quadrat sei geerdet.

### Propagation von Wellenpaketen:

Lösen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung (verwenden Sie atomare Einheiten:  $e = m_e = \hbar = 1$ ) für ein Gauss'sches Wellenpaket mit Impuls  $k_0$  (minimale Unschärfe bei  $t = 0$ ),

$$|\psi(x, t)\rangle \propto (1 + it)^{-1/4} e^{-\frac{(x - k_0 t)^2}{2(1 + it)}} e^{i(k_0 x - k_0^2 t/2)}. \quad (1)$$

Lassen Sie das Wellenpaket ein Yukawa-Potential  $V(x) = -\exp(-3|x|)/(|x| + 1)$  passieren (siehe 4. Übung). Verwenden Sie eine split-operator-Technik, zerlegen Sie also den Zeitentwicklungsoperator in mindestens zwei Teile (siehe VO), z.B.

$$e^{-iH\Delta t} \approx e^{-iT\Delta t/2} e^{-iV\Delta t} e^{-iT\Delta t/2} + O(\Delta t^3). \quad (2)$$

Die Methode erlaubt größere Zeitschritte. Führen Sie zwischen den Schritten eine FFT durch (cernlib; <http://concord.itp.tuwien.ac.at/cernlib>).

**Achtung! Fehler in den Folien! Nach FFT Multiplikation mit  $\exp(-i\lambda_k^2 \Delta t/2)$ !**

## Anleitung

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

z.B. `~/04Ue2018-04-10/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.