

Übungen zu Computational Nanoscience

– Blatt 4 –

Prof. Dr. Alexander Lichtenstein
zum 04.05.2016

Die Übung findet um 14:15 Uhr im PHYSnet-Pool 3 statt!

Aufgabe Crank-Nicolson-Algorithmus und die eindimensionale zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

In dieser Übung soll die eindimensionale zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit Hilfe des Crank-Nicolson-Algorithmus gelöst werden.

- Lade die Datei `Uebung_CN.ipynb` (ZIP-CN) auf den Desktop herunter.
- Starte das Terminal-Programm (Konsole) und navigiere auf den Arbeitsplatz (`'cd Desktop'` bzw. `'cd Arbeitsplatz'`).
- Mit dem Befehl `'ipython notebook'` wird das Programm IPython gestartet. In IPython kann das Arbeitsblatt `Uebung_CN.ipynb` dann geöffnet werden.

Aufgabe Zeitentwicklung eines Wellenpakets

- Berechne die Zeitentwicklung eines Wellenpakets, das an einem δ -Potential streut.
- Simuliere den zeitlichen Verlauf für verschiedene Potentiale.
- Variiere die Parameter des Wellenpakets und der Potentiale.