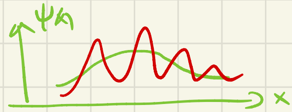
4. Eindimensionale Probleme



Betrachte einfache QM Probleme in 1d, t-unabh. V

Zeitunabh. S-glg. $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

mit Normierung $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 1$

Betrachte auch Potentiale $V(x)$ mit Stufen bzw. Unstetigkeiten

Wie verhält sich $\psi(x)$ an Unstetigkeiten von $V(x)$?

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi$$

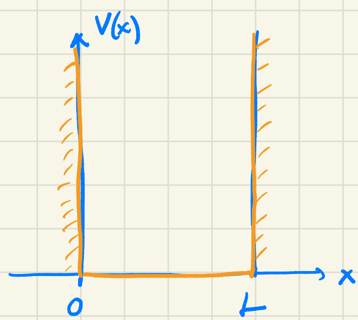
Damit ψ'' existiert, muß ψ und ψ' stetig sein!

Aber für unstetige V ist dann ψ'' unstetig.

4.1 Unendlicher Potentialtopf

→ Kasten mit undurchdringlichen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$



→ außerhalb des Kastens ist $\psi(x) = 0$, $x \leq 0$, $x \geq L$

im Innern: zeitunabh. S-glg. $(V=0, \quad 0<x<L)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$$ mit $E \in \mathbb{R}$, da $V \geq 0 \Rightarrow E \geq 0$

im Innern: S-glg. für freie Teilchen mit

Randbedingung $\psi(0) = 0 = \psi(L)$ da ψ stetig

Schreibe $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\Rightarrow \quad -\psi'' = k^2 \psi$$

Allg. Lösung $\quad \psi(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx$

Aber Randbed.: $\quad \psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n \cdot \pi \quad , \; n = 1,2,3,\ldots$$

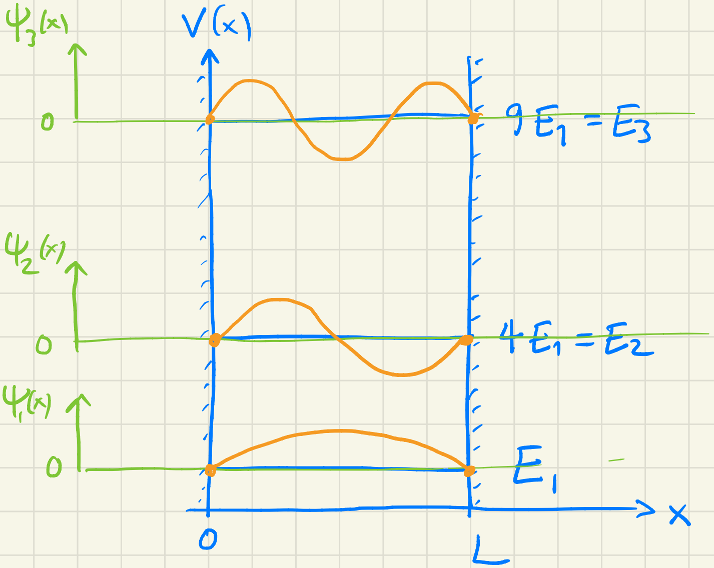
k nicht bel. sondern $\frac{n\pi}{L} = k_n$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \psi_n(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \end{aligned}} \quad , \; n = 1,2,3,\ldots \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \sim n^2$$

nur diskrete Energien sind erlaubt! $\rightarrow$ Quantisierung / E nicht kontinuierlich

$\rightarrow$ Nullpunktsenergie $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2} > 0$

Graphische Darstellung von Eigenfkten und Eigenwerten



Eigenschaften von $\psi_n(x)$ (später: gilt allg.)

- $\psi_n(x)$ sind normal orthogonal im Sinne des Skalarprodukts

$$\int_0^L dx \; \psi_n^*(x)\, \psi_m(x) = \delta_{nm}$$

- $\{\psi_n(x)\}$ sind vollst. Funktionensystem

d.h. jeder Zustand / jede $\phi(x)$ = bel. Wellenfkt. auf $[0,L]$ läßt sich in $\psi_n(x)$ entwickeln mit

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad \text{mit} \quad c_m = \int_0^L dx \; \psi_m^*(x)\, \phi(x)$$

1. $\psi_m^*(x) \cdot \int dx$ $\qquad \delta_{mn}$

NB: Beide Eigenschaften sind identisch zu Fourier Trafo Eigenschaften

$\rightarrow$ Üblatt 1: $\psi_n \sim \sin n\bar{x}$

Verallgemeinerung auf 3d. unendl. Potentialtopf

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 \, , & 0<x<L \, , \ 0<y<L \, , \ 0<z<L \\ \infty \, , & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi_{\underbrace{n_x, n_y, n_z}_{\vec{n}}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2^3}{L^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} \cdot x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right)$$

mit $n_{x,y,z} = 1, 2, 3, \dots$

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

$\Rightarrow$ Grundzustand: $n_x = n_y = n_z = 1$ $\quad E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot 3$

1. angeregter Zustand: $n_x = n_y = 1, \ n_z = 2$

$n_x = n_z = 1, \ n_y = 2$ $\quad E_{1. \text{ang. Zustands}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot 6$

$n_y = n_z = 1, \ n_x = 2$

$\Leftarrow$ mit 3 unterschiedlichen Eigenfkten $\rightarrow$ $E_{1. \text{ang. Zustand}}$ 3-fach entartet

4.2 Endlicher Potentialtopf