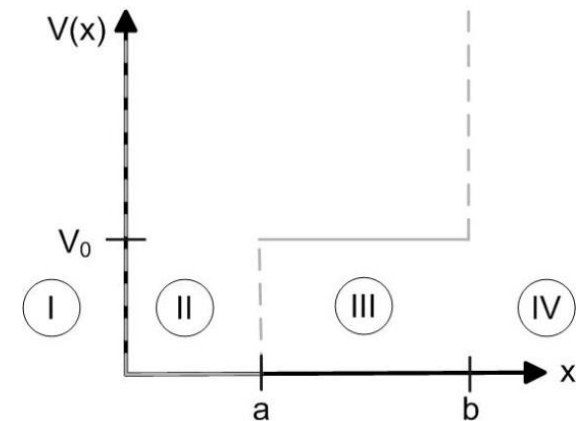
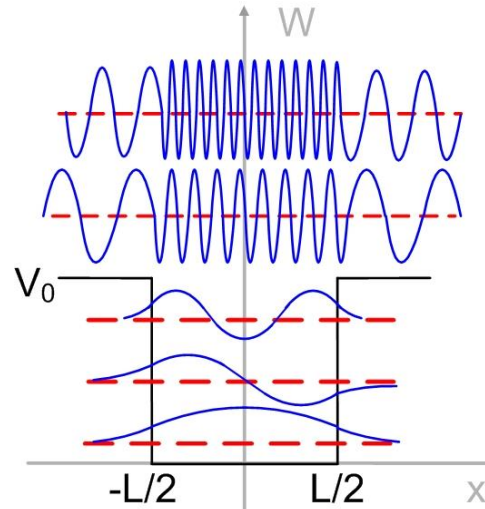
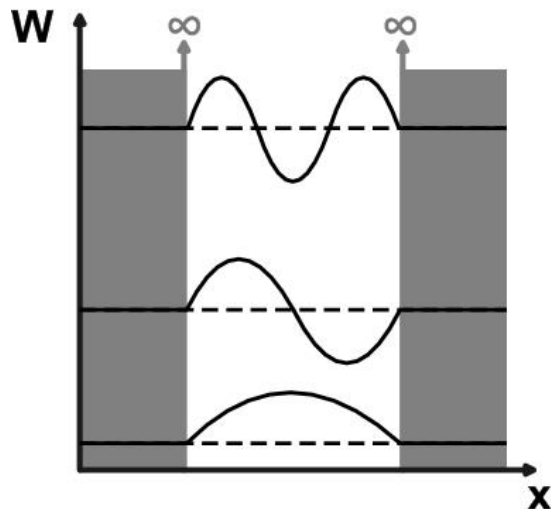


Quantenmechanische Erwartungswerte & Elektronische Zustände

2. Übung Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)



Organisatorisches

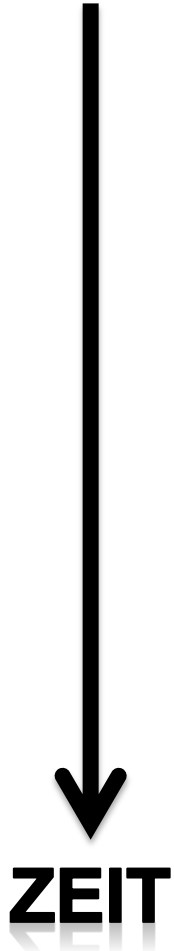
Wochenende
Feiertag
Vorlesung
Übung
Tutorium
IF: Institutsführung
Brückentag
Ausgabe: Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand: 11.05.2016

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		1. Mai Feiertag		V10
2		Ausgabe Ü2/T2	V5	
3			Ü3 Ausgabe Ü4/T4	
4				
5		Christi Himmelfahrt		
6		Brückentag	Tut-Woche 3	
7				V11
8				Ü6 Ausgabe Ü7/T7
9		Tut-Woche 1	V6	
10			V7	
11				Tut-Woche 6
12		Ü2		
13		V4		
14				V12
15		Pfingsten		
16		Pfingstmontag	Ü4	
17			Ausgabe Ü5/T5	
18	VL-Beginn			Tut-Woche 7
19				
20			Tut-Woche 4	
21	V1 Ausgabe Ü1/T1			V13
22	V2			Ü7
23		Ausgabe Ü3/T3	V8 anschl. Institutsführung	VL-Ende
24			Ü5 Ausgabe Ü6/T6	
25				
26		Fronleichnam		
27		Brückentag	Tut-Woch 5	
28	V3			
29	Ü1			
30		Tut-Woche 2	V9	
31				

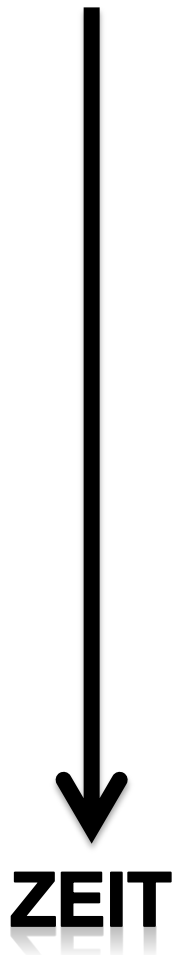
alle Donnerstagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im MTI-Hörsaal (Geb. 30.33) statt
alle Freitagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im NTI-Hörsaal (Geb. 30.10) statt

Stand der Dinge



1. Grundlagen der Quantenphysik
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen im Kristall
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Ladungsträgerdynamik im Halbleiter
9. Der pn-Übergang

Stand der Dinge



1 Grundlagen der Quantenmechanik

- 1.1 Einleitung
- 1.2 Historisches
- 1.3 Die Schrödinger-Gleichung
- 1.4 Das freie quantenmechanische Elektron
- 1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte

Ü-Blatt 1

2 Elektronische Zustände

- 2.1 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung
- 2.2 Der unendlich hohe Potentialtopf
- 2.3 Der endliche Potentialtopf
- 2.4 Potentialbarrieren
- 2.5 Eigentliche und uneigentliche Zustände
- 2.6 Quantenmechanische Messungen

Ü-Blatt 2

Wiederholung

■ Welle-Teilchen-Dualismus

■ de Broglie Beziehung

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{bzw.} \quad p = \hbar k \quad \text{mit} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{und} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

■ Unschärferelation

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

■ Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$j\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi(x, t)$$

Dispersionsrelation

- Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz und Wellenzahl

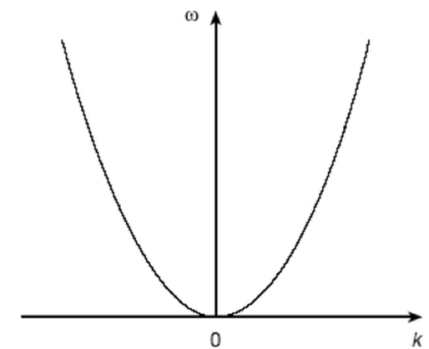
- Photon im Vakuum: $\lambda f = c \rightarrow \frac{1}{k} \omega = c \rightarrow \omega(k) = ck$

- Freies Teilchen

- Ansatz: ebene Welle $\psi(x, t) = Ae^{j(kx - \omega t)}$

- Einsetzen in Schrödinger-Gleichung ergibt:

$$\left(\hbar \omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) Ae^{j(kx - \omega t)} = 0 \rightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$



Phasengeschwindigkeit

- Geschwindigkeit, mit der sich ein Punkt konstanter Phase fortbewegt
 - Argument der Wellenfunktion muss konstant sein

$$(kx - \omega_k t) = \text{const.}$$



$$\frac{\partial}{\partial t} (kx - \omega_k t) = 0$$

$$(kv_{Ph} - \omega_k) = 0$$

$$v_{Ph} = \frac{\omega_k}{k}$$

- Freies Teilchen:

$$v_{Ph} = \frac{\hbar k}{2m}$$

- Photon im Vakuum:

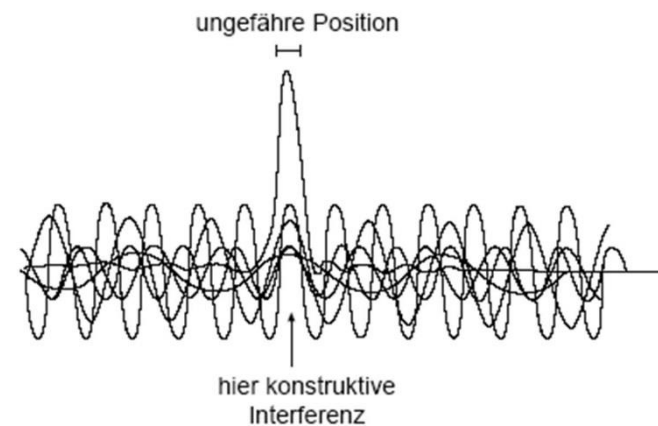
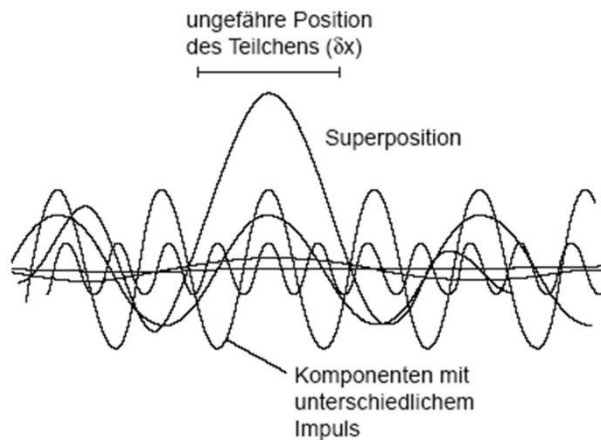
$$v_{Ph} = c$$

Wellenpakete

■ Superposition ebener Wellen für lokalisiertes Teilchen

■ Viele verschiedene Frequenzen

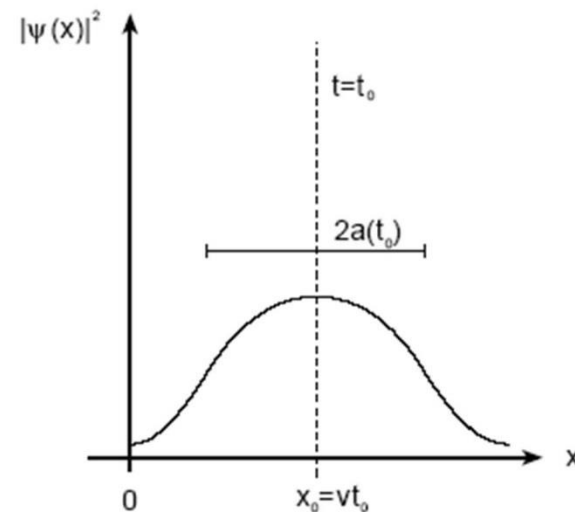
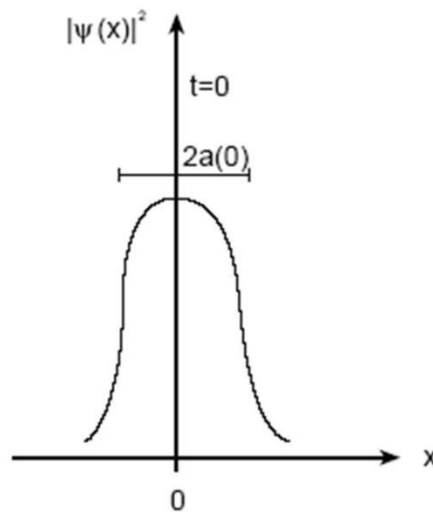
$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{j(kx - \omega_k t)} dk$$



■ Fouriertransformation: Impulsraum $\longleftrightarrow$ Ortsraum

Dispersion von Wellenpaketen

- Frequenzabhängigkeit der Phasengeschwindigkeit
- Die unterschiedlichen monochromatischen Wellen bewegen sich mit unterschiedlicher Phasengeschwindigkeit fort
- Folge: Wellenpakete können zerfließen



Dispersion

- Geschwindigkeit des Schwerpunktes des Wellenpaketes heißt Gruppengeschwindigkeit
- Gruppengeschwindigkeit und Phasengeschwindigkeit

- Allgemein:

$$v_G = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}$$

$$v_{Ph} = \frac{\omega(k)}{k}$$

- Photonen im Vakuum:

$$v_G = c$$

$$v_{Ph} = c$$

- Freie Elektronen im Vakuum:

$$v_G = \frac{\hbar k}{m}$$

$$v_{Ph} = \frac{\hbar k}{2m}$$

A1 a) Das freie Elektron

In einem Elektronenmikroskop werden Elektronen mit einer de-Broglie Wellenlänge von $\lambda = 10^{-11}\text{m}$ verwendet. Welche kinetische Energie besitzt ein einzelnes Elektron? Die nicht-relativistische Näherung sei gültig!

- Ansatz: Impuls des Elektrons über de Broglie-Beziehung bestimmen.

$$W = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m_e} = 2,41 \text{ fJ} = 15.04 \text{ keV}$$

A1 b) Das freie Elektron

Berechnen sie die Phasengeschwindigkeit v_{ph} und die Gruppengeschwindigkeit v_g für Photonen und Elektronen.

■ Ansatz:
$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad \& \quad v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k}$$

■ Photonen:

$$\omega_{\text{Photon}}(k) = ck \quad \rightarrow \quad v_{\text{ph}} = v_g = c$$

■ Elektronen:

$$\omega_{\text{Elektron}}(k) = \frac{\hbar k^2}{2m_e} \quad \rightarrow \quad v_{\text{ph}} = \frac{\hbar k}{2m_e} \quad \& \quad v_g = \frac{\hbar k}{m_e}$$

[http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/13/vlu/spektroskopie/theorie/dispersi
on.vlu/Page/vsc/de/ch/13/pc/spektroskopie/theorie/dispersion/disp6.vscml.html](http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/13/vlu/spektroskopie/theorie/dispersi
on.vlu/Page/vsc/de/ch/13/pc/spektroskopie/theorie/dispersion/disp6.vscml.html)

A1 c) Das freie Elektron

Berechnen Sie mit Hilfe des Impulsoperators den Impulserwartungswert $\langle \hat{p}(t) \rangle$ und das Impulserwartungswertquadrat $\langle \hat{p}^2(t) \rangle$ für ein freies Elektron. Bestimmen Sie damit die Unschärfe des Impulses

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2(t) \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2}.$$

Was folgt daraus über die Unschärferelation für die Ortsunschärfe Δx ?

Einschub: Quantenmechanischer Operator

- Physikalische Messgrößen (Observable) werden in der QM durch einen hermiteschen Operatoren beschrieben

- Beispiele:

Ortsoperator:

$$\hat{x} = x$$

Impulsoperator:

$$\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Operator für die kinetische Energie:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

- Der Erwartungswert eines Operators $\hat{A}$ berechnet sich zu:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx}$$

A1 c) Das freie Elektron

Berechnen Sie mit Hilfe des Impulsoperators den Impulserwartungswert $\langle \hat{p}(t) \rangle$ und das Impulserwartungswertquadrat $\langle \hat{p}^2(t) \rangle$ für ein freies Elektron. Bestimmen Sie damit die Unschärfe des Impulses

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2(t) \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2}.$$

Was folgt daraus über die Unschärferelation für die Ortsunschärfe Δx ?

■ Wellenfunktion eines freien Elektrons:

Ebene Welle

$$\Psi(x, t) = A \exp(j(kx - \omega t))$$

■ Impulsoperator:

$$\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

A1 c) Das freie Elektron

- 1. Berechnen von $\langle \hat{p} \rangle$:

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{\int \Psi^*(x, t) \hat{p} \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx} = \frac{\int \Psi^*(x, t) \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx}$$

- Ableitung von Ψ nach x :

$$\frac{\partial}{\partial x} A \exp(j(kx - \omega t)) = jk A \exp(j(kx - \omega t)) = jk \Psi(x, t)$$

$$\rightarrow \langle \hat{p} \rangle = \frac{\int \Psi^*(x, t) (-j^2 \hbar k) \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx} = \hbar k \frac{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx} = \hbar k$$

A1 c) Das freie Elektron

- 2. Berechnen von $\langle \hat{p}^2 \rangle$:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\int \Psi^*(x, t) \hat{p}^2 \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx} = \frac{\int \Psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx}$$

- 2-fache Ableitung von Ψ nach x :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} A \exp(j(kx - \omega t)) = -k^2 A \exp(j(kx - \omega t)) = -k^2 \Psi(x, t)$$

$$\rightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2 k^2 \frac{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx}{\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx} = \hbar^2 k^2$$

A1 c) Das freie Elektron

■ 3. Berechnen von Δp :

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2(t) \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2} = \sqrt{\hbar^2 k^2 - (\hbar k)^2} = 0$$

■ Unschärferelation:

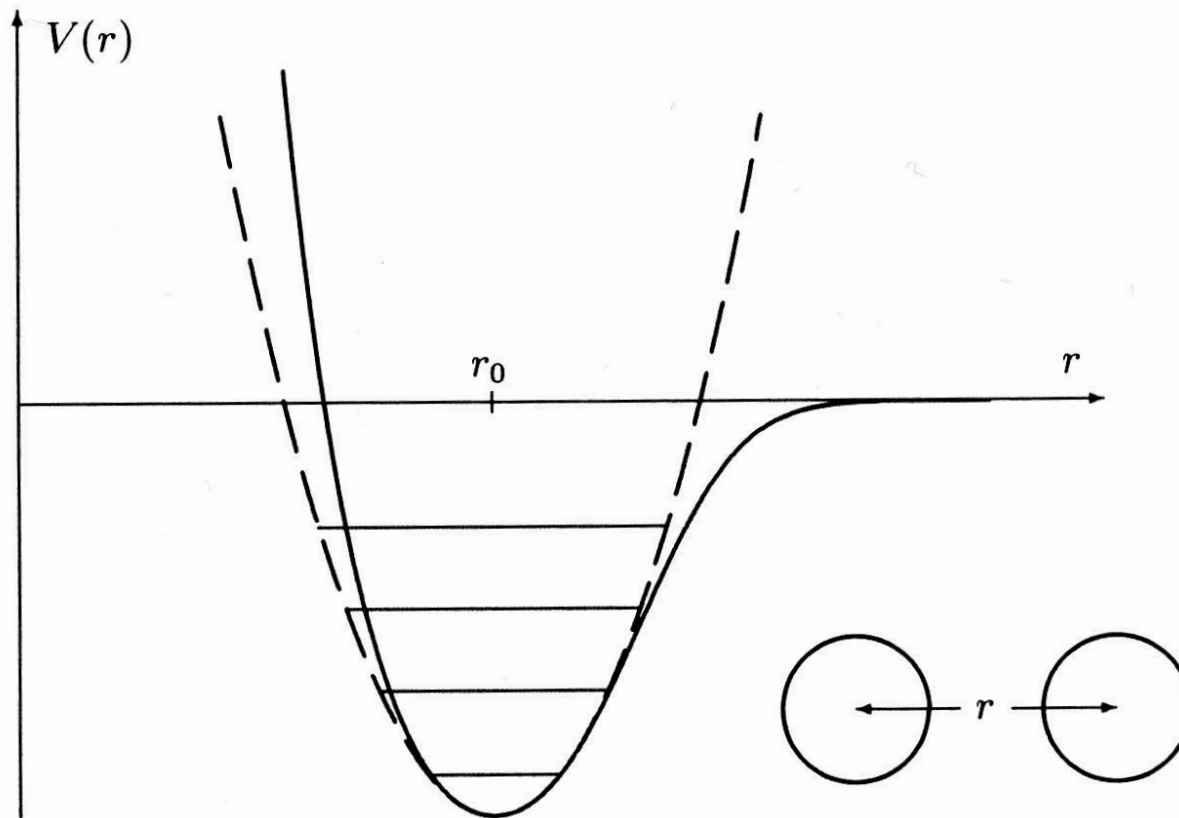
$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$



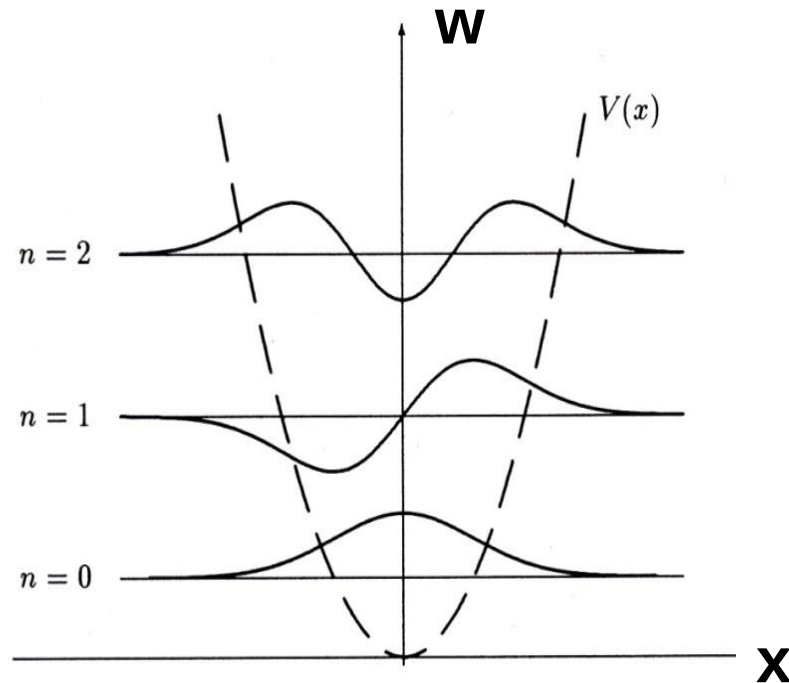
$$\Delta x \rightarrow \infty$$

A2 Parabolisches Potential

- Beispiel aus der Molekülphysik: Lennard-Jones Potential



A2 Parabolisches Potential



Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

A2 a) Parabolisches Potential

■ Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\Psi(x) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{Operator kinetische Energie}} + \underbrace{V(x)}_{\text{Operator potentielle Energie}} \right) \Psi(x) = \underbrace{W}_{\text{Energie-Eigenwert}} \Psi(x)$$

■ Potentielle Energie:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

A2 a) Parabolisches Potential

■ Eigenfunktionen:

$$\psi_n = \frac{c_n}{\sqrt{b}} \underbrace{H_n\left(\frac{x}{b}\right)}_{\text{Hermiteische Polynome}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

{

$$\psi_0 = \frac{c_0}{\sqrt{b}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

$$\psi_1 = \frac{c_1}{\sqrt{b}} 2 \frac{x}{b} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

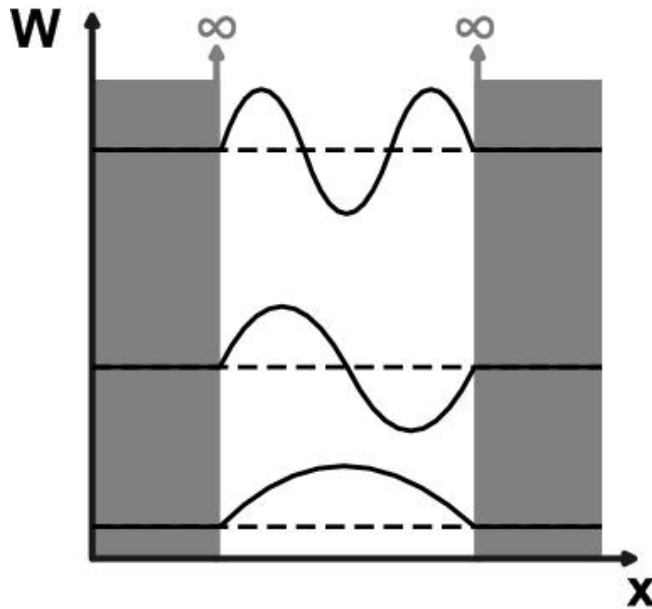
Mit $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und $H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2)$

■ Eigenwerte:

$$W_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

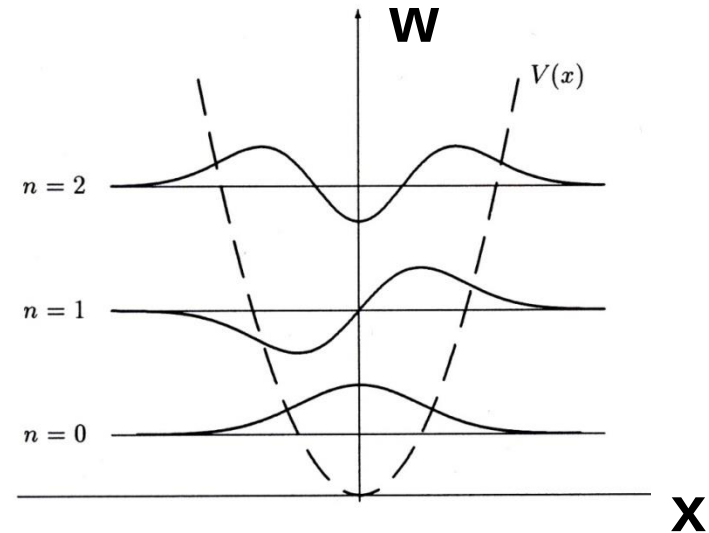
$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

A2 b) Parabolisches Potential



Unendlicher Potentialtopf

- abwechselnd gerade-ungerade
- Grundzustand gerade
- Knoten an Rändern



Harmonischer Oszillator

- abwechselnd gerade-ungerade
- Grundzustand gerade
- Keine Knoten an Rändern

A2 b) Parabolisches Potential

Unendlicher Potentialtopf

- $W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2$
- Diskrete Energieeigenwerte
- Abstand der Energieeigenwerte steigt quadratisch $\Delta W \propto n^2$
- Grundzustandsenergie:

$$W_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 > 0$$

Harmonischer Oszillator

- $W_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$
- Diskrete Energieeigenwerte
- Äquidistante Energieeigenwerte

$$\Delta W = \hbar\omega$$
- Grundzustandsenergie:

$$W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$$

A2 c) Parabolisches Potential

■ Allgemeines Vorgehen:

$$\hat{H}\Psi_n(x, t) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{Operator kinetische Energie}} + \underbrace{V(x)}_{\text{Operator potentielle Energie}} \right) \Psi_n(x, t) = W_n \Psi_n(x, t)$$

Diagram illustrating the components of the Hamiltonian operator $\hat{H}$ and the resulting eigenvalue equation:

- The Hamiltonian operator $\hat{H}$ is composed of the kinetic energy operator $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ and the potential energy operator $V(x)$.
- The eigenvalue equation is $\hat{H}\Psi_n(x, t) = W_n \Psi_n(x, t)$.
- The eigenvalue W_n is labeled as "Energie-Eigenwert".
- The eigenfunction $\Psi_n(x, t)$ is labeled as "Eigenfunktion".

A2 c) Parabolisches Potential

- Löst Ψ_0 die Schrödinger-Gleichung?

$$\hat{H}\Psi_0(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \left(\frac{c_0}{\sqrt{b}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \right)$$

- 2-fache Ableitung von Ψ_0 nach x :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0(x, t) = \left(-\frac{1}{b^2} + \frac{x^2}{b^4} \right) \Psi_0(x, t) \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

- Lösen:

$$\hat{H}\Psi_0(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \Psi_0(x, t) = \underbrace{\frac{\hbar\omega}{2}} \Psi_0(x, t)$$

Energie-Eigenwert

A2 c) Parabolisches Potential

- Löst Ψ_1 die Schrödinger-Gleichung?

$$\hat{H}\Psi_1(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \left(\frac{c_0}{\sqrt{b}} 2 \frac{x}{b} \exp \left(-\frac{x^2}{2b^2} \right) \right)$$

- 2-fache Ableitung von Ψ_1 nach x :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_1(x, t) = \left(-\frac{3}{b^2} + \frac{x^2}{b^4} \right) \Psi_1(x, t)$$

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

- Lösen:

$$\hat{H}\Psi_1(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{3m\omega}{\hbar} + \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \Psi_1(x, t) = \underbrace{\frac{3\hbar\omega}{2}} \Psi_1(x, t)$$

Energie-Eigenwert

A2 d) Parabolisches Potential

Berechnen Sie den Erwartungswert der kin. Energie im Grundzustand.

■ Normierter Grundzustand: $\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{b}\sqrt{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$ mit $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

■ Operator der kinetischen Energie: $\hat{W}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

■ Erwartungswert der kinetischen Energie:

$$\langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle = \frac{\int \Psi_0^*(x, t) \hat{W} \Psi_0(x, t) dx}{\int \Psi_0^*(x, t) \Psi_0(x, t) dx} = \int \Psi_0^*(x, t) \hat{W} \Psi_0(x, t) dx = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

A2 e) Parabolisches Potential

Berechnen Sie den Erwartungswert der pot. Energie im Grundzustand.

- Gesamtenergie berechnet sich aus der Summe der kinetischen und der potentiellen Energie:

- Kinetischen Energie: $\langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega$; Gesamtenergie: $\langle \hat{W} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega$

→ potentielle Energie: $\langle \hat{W}_{\text{pot}} \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega$

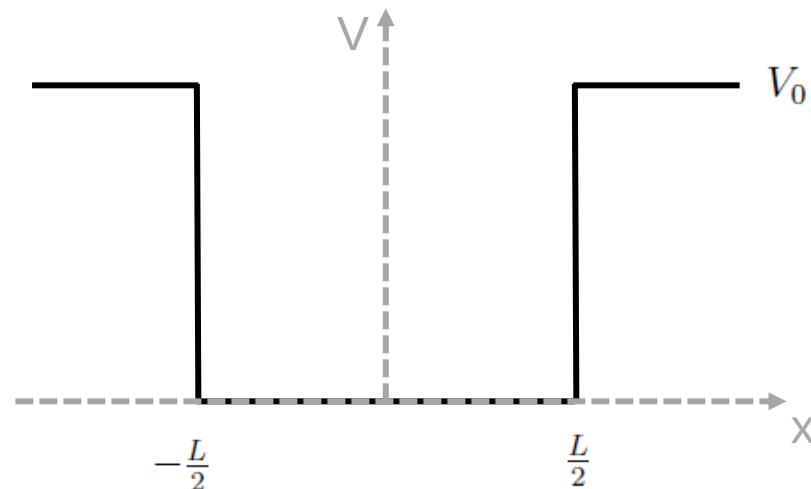
A3 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

Gegeben sei das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x < -\frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{für } x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

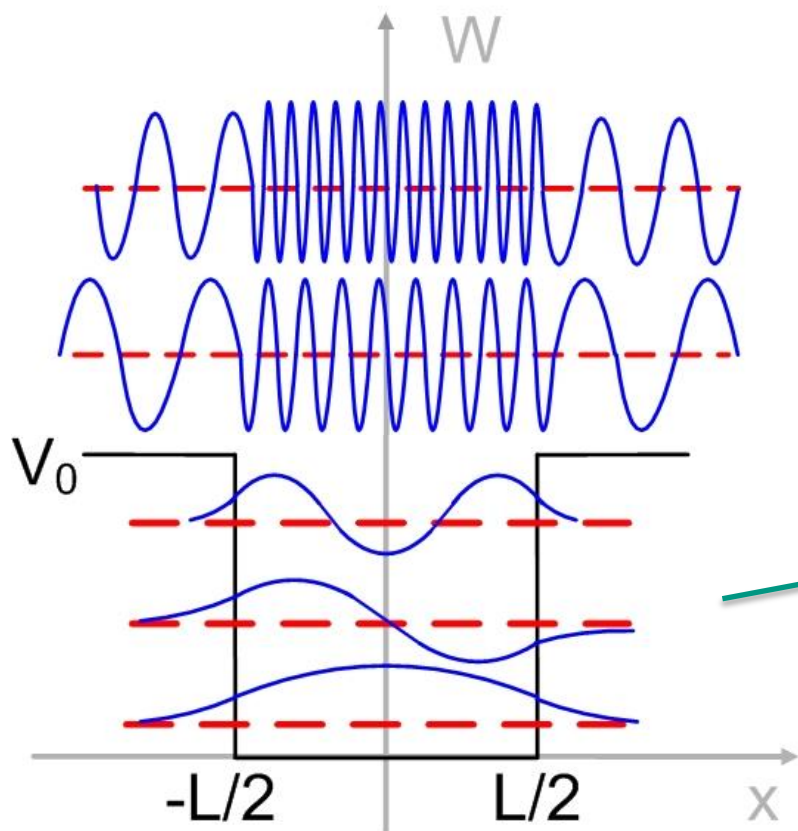
eines endlichen Potentialtopfes der Tiefe V_0 .

a) Skizzieren Sie $V(x)$.



A3 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

- b) Zeichnen sie die zugehörigen Eigenfunktionen für $W < V_0$ und zwei Eigenfunktionen für $W > V_0$ ein. Gehen Sie davon aus, dass es genau drei gebundene Eigenzustände gibt. Worin unterscheiden sich die Wellenfunktionen für $W < V_0$ und $W > V_0$ qualitativ?



Ungebundene Zustände:

- kontinuierliche Energien
- unendlich ausgedehnt

Gebundene Zustände:

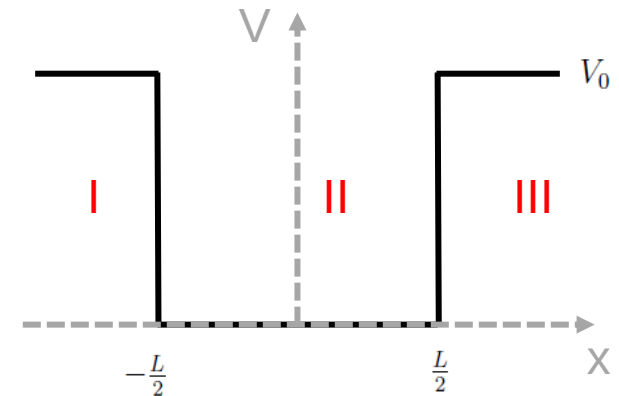
- diskrete Energien
- räumlich begrenzt

A3 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

- c) Welche Gleichung liefert die Lösung für die elektronischen Zustände in einem solchen System mit $W < V_0$? Machen Sie Lösungsansätze für die drei Bereiche mit konstantem Potential und stellen Sie die zur Lösung nötigen Rand- und Nebenbedingungen auf. Setzen Sie die Ansätze in die erhaltenen Bedingungen ein. Das explizite Lösen dieses Gleichungssystems ist **nicht** verlangt!

■ Zeitunabhängige SGL:

$$W\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x)$$



- Ansatz: Überlagerung aus einer nach rechts (+) und links (-) laufenden Welle für jeden Bereich

$$\Psi_i(x) = A_i^+ e^{+jk_i x} + A_i^- e^{-jk_i x}$$

A3 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

c) $W < V_0$:

■ Beispielhafte Betrachtung im Bereich I:

■ Ansatz

$$\psi_I(x) = Ae^{jk_I x} + Be^{-jk_I x}$$

■ Bestimmung von k

$$k_I = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (W - V_0)} = j \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - W)} = j\kappa_I$$

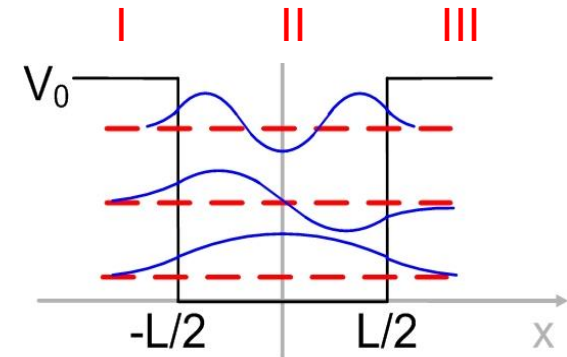
■ Exponentielles Abklingen in Barriere

$$A = 0$$

(da in Abschnitt I
steigende
Exponentialfunktion)



Analog für Bereich III
 $V = 0$ für Bereich II



$$\psi_I(x) = Be^{\kappa_I x}$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{jk_{II} x} + De^{-jk_{II} x}$$

$$\psi_{III}(x) = Ee^{-\kappa_{III} x}$$

A3 c) Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

■ Randbedingungen:

■ Stetig:

$$\psi_I(-L/2) = \psi_{II}(-L/2)$$

$$\psi_{II}(L/2) = \psi_{III}(L/2)$$

■ Stetig differenzierbar:

$$\psi'_I(-L/2) = \psi'_{II}(-L/2)$$

$$\psi'_{II}(L/2) = \psi'_{III}(L/2)$$

■ Einsetzen des Ansatzes in Randbedingungen liefert ein lösbares Gleichungssystem mit 4 Gleichungen und 4 Unbekannten:

$$1: \quad B \exp(-\kappa_1 L/2) = D \exp(+jk_2 L/2) + C \exp(-jk_2 L/2)$$

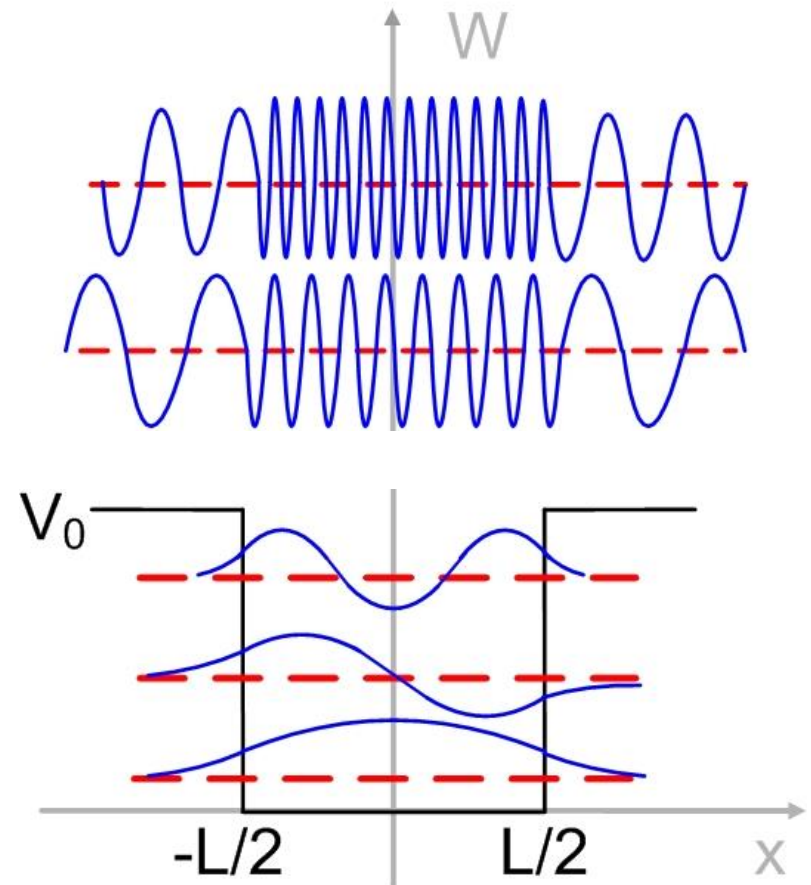
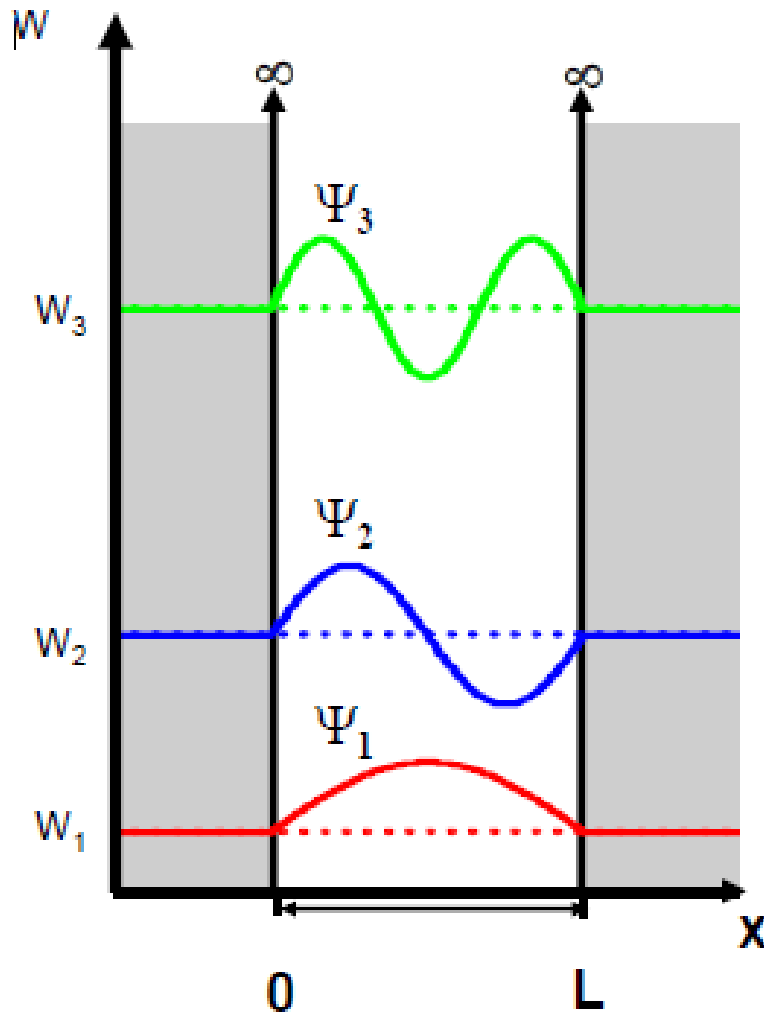
$$2: \quad B(\kappa_1) \exp(-\kappa_1 L/2) = D(-jk_2) \exp(+jk_2 L/2) + C(jk_2) \exp(-jk_2 L/2)$$

$$3: \quad D \exp(-jk_2 L/2) + C \exp(+jk_2 L/2) = E \exp(-\kappa_3 L/2)$$

$$4: \quad D(-jk_2) \exp(-jk_2 L/2) + C(jk_2) \exp(+jk_2 L/2) = E(-\kappa_3) \exp(-\kappa_3 L/2)$$

<http://phet.colorado.edu/en/simulation/bound-states>

A3 d) Vergleich: Potentialtopf mit unendlich und endlich hohen Wänden



A4 a) Stückweise konstantes Potential

■ Gegeben sei das Potential:

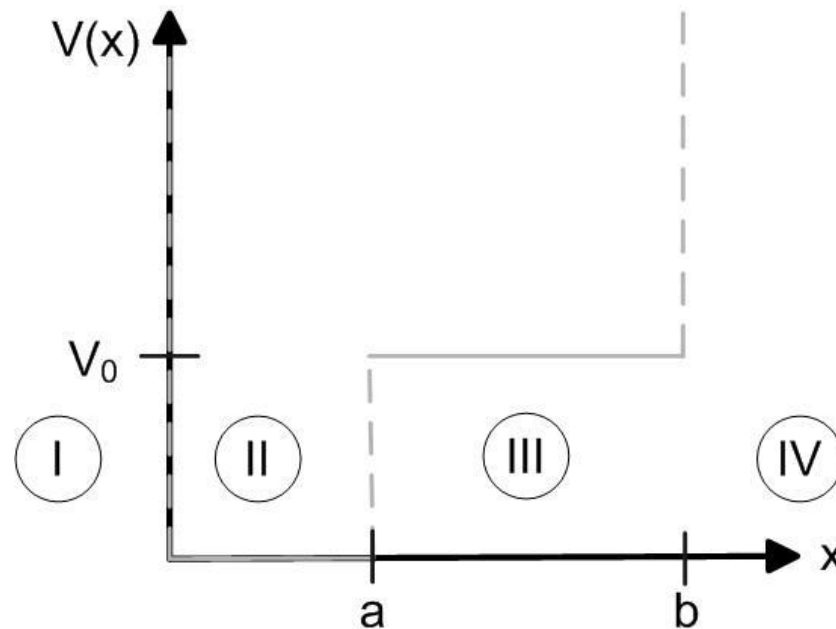
$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 & \text{Bereich I} \\ 0 & : 0 \leq x < a & \text{Bereich II} \\ V_0 & : a \leq x < b & \text{Bereich III} \\ \infty & : x \geq b & \text{Bereich IV} \end{cases}$$

Skizzieren Sie den Potentialverlauf!

A4 a) Stückweise konstantes Potential

■ Gegeben sei das Potential:

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 \quad \text{Bereich I} \\ 0 & : 0 \leq x < a \quad \text{Bereich II} \\ V_0 & : a \leq x < b \quad \text{Bereich III} \\ \infty & : x \geq b \quad \text{Bereich IV} \end{cases}$$



A4 b) Stückweise konstantes Potential

Bestimmen Sie die Energie-EW eines Teilchens mit der Energie $W > V_0$

■ Bereich I & IV

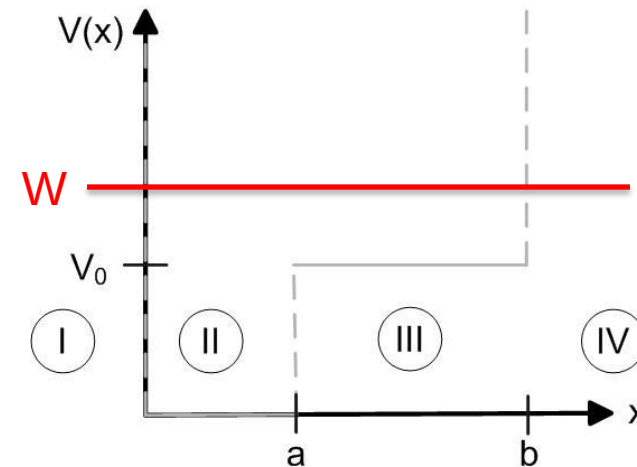
$$\Psi_1(x) = \Psi_4(x) = 0$$

■ Bereich II

$$\Psi_2(x) = Ae^{jk_2x} + Be^{-jk_2x}$$

■ Bereich III

$$\Psi_3(x) = Ce^{jk_3x} + De^{-jk_3x}$$



$$k_2 = \sqrt{2mW/\hbar^2}$$

$$k_3 = \sqrt{2m(W - V_0)/\hbar^2}$$

A4 b) Stückweise konstantes Potential

Bestimmen Sie die Energie-EW eines Teilchens mit der Energie $W > V_0$

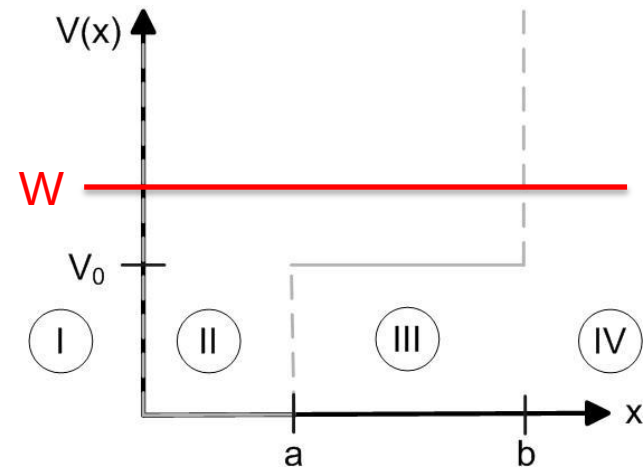
■ Randbedingungen:

$$\psi_2(0) = 0$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\psi'_2(a) = \psi'_3(a)$$

$$\psi_3(b) = 0$$



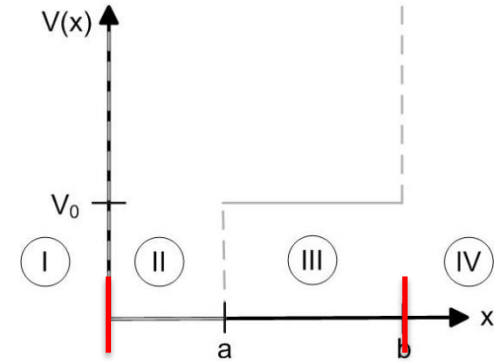
■ 4 unabhängige Gleichungen & 4 Konstanten:
→ lösbares Gleichungssystem

A4 b) Stückweise konstantes Potential

$$\Psi_2(0) = 0 = Ae^{jk_2 0} + Be^{-jk_2 0} = A + B \rightarrow B = -A$$

$$\rightarrow \Psi_2(x) = A(e^{jk_2 x} - e^{-jk_2 x}) = 2jA \sin(k_2 x)$$

K_2



$$\Psi_3(b) = 0 = Ce^{jk_3 b} + De^{-jk_3 b} \rightarrow D = -Ce^{j2k_3 b}$$

$$\rightarrow \Psi_3(x) = C(e^{jk_3 x} - e^{j2k_3 b} e^{-jk_3 x})$$

$$\Psi_3(x) = Ce^{jk_3 b} (e^{jk_3(x-b)} - e^{-jk_3(x-b)}) = 2jCe^{jk_3 b} \sin(k_3(x-b))$$

K_3

A4 b) Stückweise konstantes Potential

$$\Psi_2(x) = K_2 \sin(k_2 x)$$

$$\Psi_3(x) = K_3 \sin(k_3(x - b))$$

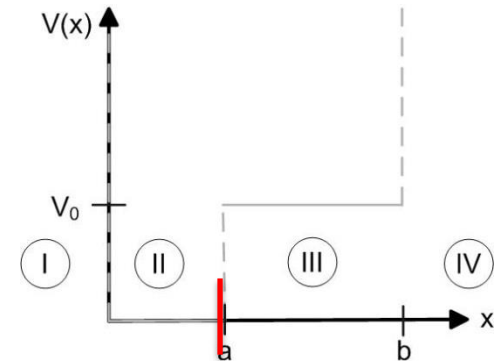
$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \rightarrow$$

$$K_2 \sin(k_2 a) = K_3 \sin(k_3(a - b))$$

$$\Psi'_2(a) = \Psi'_3(a) \rightarrow$$

$$K_2 k_2 \cos(k_2 a) = K_3 k_3 \cos(k_3(a - b))$$

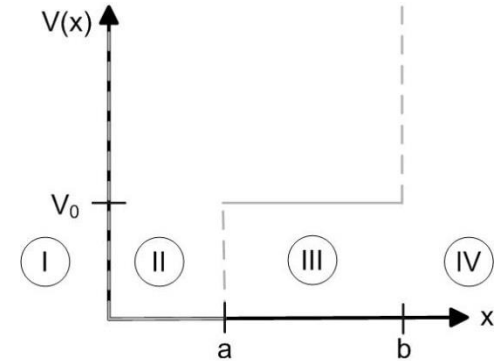
$$\frac{1}{k_2} \tan(k_2 a) = \frac{1}{k_3} \tan(k_3(a - b))$$



A4 b) Stückweise konstantes Potential

$$\frac{1}{k_2} \tan(k_2 a) = \frac{1}{k_3} \tan(k_3(a - b))$$

$$\rightarrow \frac{k_2}{k_3} = \frac{\tan(k_2 a)}{\tan(k_3(a - b))}$$



■ Mit $k_2 = \sqrt{2mW/\hbar^2}$ und $k_3 = \sqrt{2m(W - V_0)/\hbar^2}$

$$\sqrt{\frac{W}{(W - V_0)}} = \frac{\tan(\sqrt{2mW/\hbar^2} a)}{\tan(\sqrt{2m(W - V_0)/\hbar^2}(a - b))}$$

■ Nicht analytisch lösbar!

Aufgabentypen/Lösungsmethoden in der QM

Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

1. Aufstellen/Auswerten des Ausdrucks für das Potential $V(x)$
2. Das Problem in **verschiedene Gebiete** mit jeweils konstantem Potential aufteilen
3. Für jeden Bereich **ebenen Wellen** ansetzen:

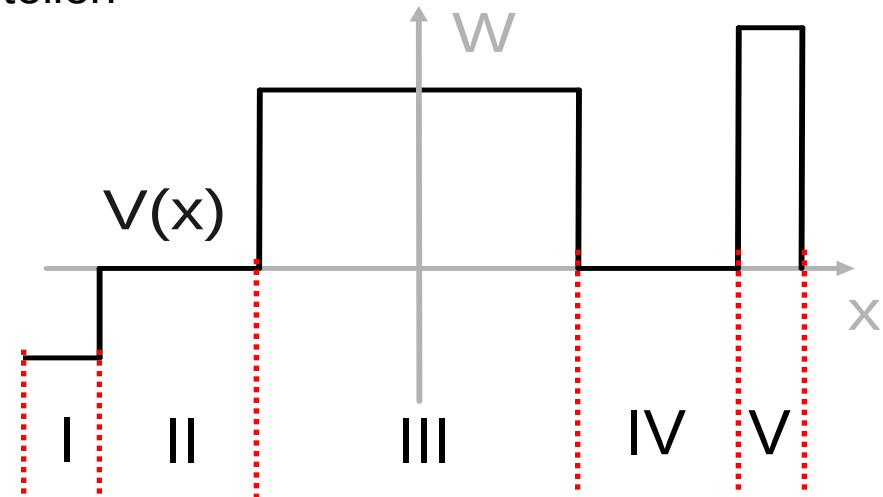
$$\begin{aligned}\psi_i(x) &= A^+ \exp(+jk_i x) + A^- \exp(-jk_i x) \quad , \\ \psi_{i+1}(x) &= B^+ \exp(+jk_{i+1} x) + B^- \exp(-jk_{i+1} x) \quad , \text{ etc.}\end{aligned}$$

4. **Rand- und Nebenbedingungen** aufstellen

1. Im Unendlichen
2. An endlichen Sprüngen gelten die Stetigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned}\psi_i(x_0) &= \psi_{i+1}(x_0) \\ \psi'_i(x_0) &= \psi'_{i+1}(x_0)\end{aligned}$$

5. **Einsetzen und Auswerten** der Rand- und Nebenbedingungen
6. Erhaltenes **Gleichungssystem lösen**



Zusammenfassende Fragen

- Was sind Operatoren in der Quantenmechanik? Welche kennen Sie?
- Wie berechnet man einen quantenmechanischen Erwartungswert?
- Warum ist der unendliche Potentialtopf ein hilfreiches Modell?
- Was sind Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Lösung des unendlichen Potentialtopfs und des Potentials eines harmonischen Oszillators?
- Welche wichtigen Aspekte der Quantenmechanik zeigen sich am Modellsystem des endlichen Potentialtopfs?
- Wie löst man Probleme mit stückweise konstanten Potentialen?

Ankündigungen

- Tutorium 17: heute, 14:00, Geb. 30.34 Raum 119
- Tutorium 18: heute, 14:00, **Geb. 10.81 HS62 (R153)**

Ankündigungen

- Lösungen zur 2. Übung: 12. Mai 2016 (nach der Übung) in ILIAS
 - Tutorien zur 2. Übung: 30. Mai. – 3. Juni 2016
 - Lösungen zum 2. Tutorium: 3. Juni 2016 in ILIAS
-
- Nächste Vorlesung: Morgen, 13. Mai 2016 im NTI, 11:30
-
- Nächste Übung (Ü3): 3. Juni 2016