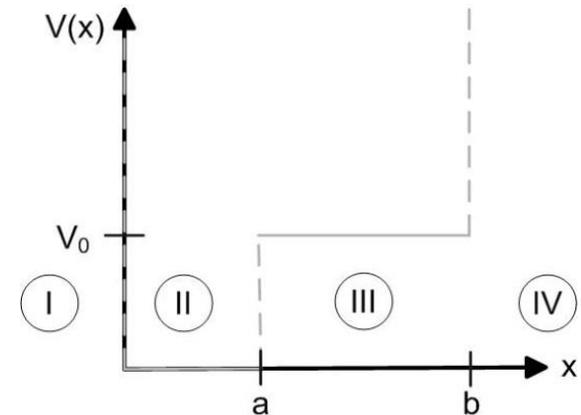
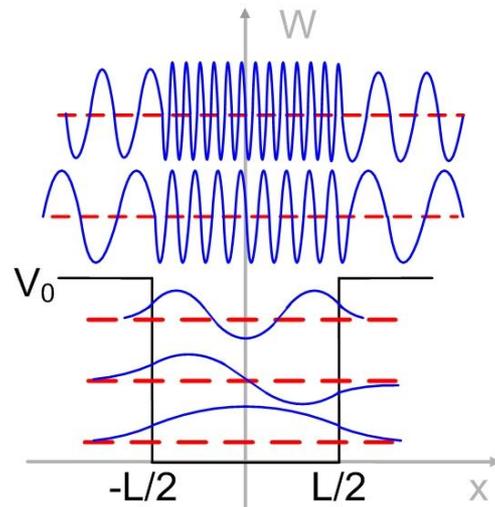
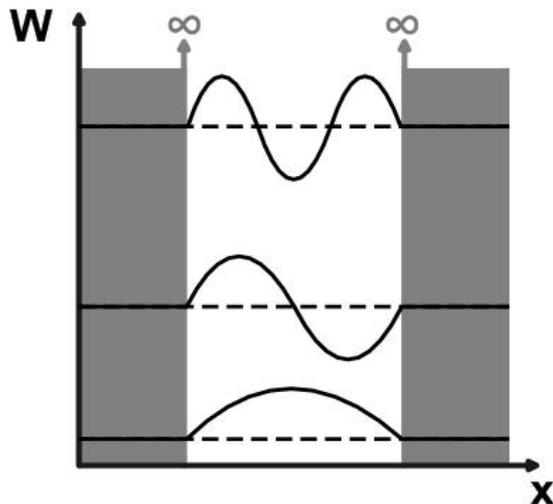


Quantenmechanische Erwartungswerte & Elektronische Zustände

3. Übung Optik und Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)



Terminplanung

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		1. Mai Feiertag	Pfingstmontag	
2			V11 FE (8)	V17 FE (14)
3				Ü8 FE (7), Ausgabe T7
4			V12 FE (9)	
5		V4 FE (1)	U5 FE (4), Ausgabe T3	
6				Tut 6
7		V5 FE (2), Ausgabe U2		V18 FE (15)
8				
9			V13 FE (10)	V19 FE (16), (Institutsführung)
10			Ausgabe Ü6/T4	Ausgabe Ü9/T8
11		Tut 1	Fronleichnam	
12		V6 FE (3), Ausgabe Ü3	Brückentag	
13				Tut 7
14		Ü2 FE (1)		V20 FE (17)
15		V7 FE (4), Ausgabe T2	Tut 3	
16			V14 FE (11)	
17				Ü9 FE (8), Ausgabe U10
18				
19		Ü3 FE (2)	Ü6 FE (5), Ausgabe Ü7/T5	
20	VL-Beginn	Ausgabe Ü4		Tut 8
21	V1 Optik (1), Ausgabe Ü1	Christi Himmelfahrt		V21 FE (18)
22		V8 FE (5)	Tut 4	
23	V2 Optik (2)		V15 FE (12)	V22 FE (19)
24				Ü10 FE (9), VL-Ende
25		Tut 2		
26		V9 FE (6)	Ü7 FE (6), Ausgabe Ü8/T6	
27				
28	V3 Optik (3)	V10 FE (7)		
29	Deadline Tut.-Anmeldung	Ü4 FE (3), Ausgabe Ü5	Tut 5	
30	U1 Optik, Ausgabe T1		V16 FE (13)	
31		Pfingsten		

- Wochenende
- Feiertag
- Vorlesung
- Übung
- Tutorium
- Brückentag

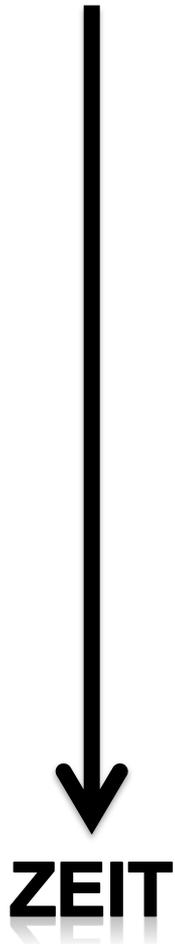
Ausgabe:
 Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand: 04.05.2020



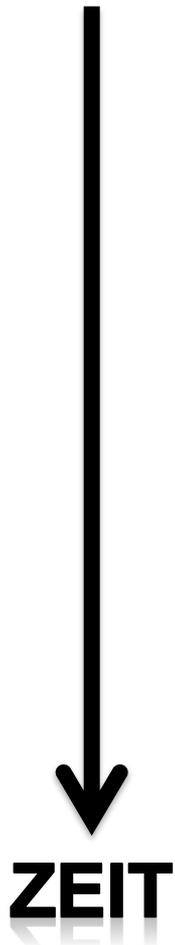
Dienstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal
 Donnerstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal
 Freitagstermine: 11:30 - 13:00, 11.40 Johann-Gottfried-Tulla-Hörsaal

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 2

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 3

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

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

<https://www.youtube.com/watch?v=RdxO9AsNBPw>

Dispersionsrelation

- Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz und Wellenzahl

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

- Freies Teilchen

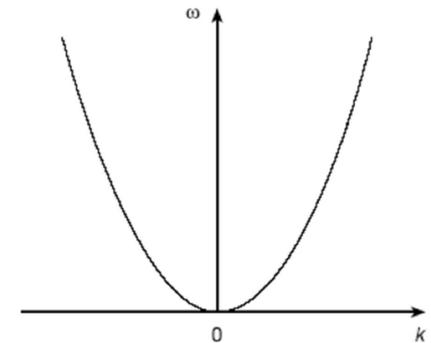
- Ansatz: ebene Welle

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

Hinweis: <https://www.youtube.com/watch?v=xkG86pwaOH0>

- 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

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



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

$$(k v_{Ph} - \omega_k) = 0$$

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

- Freies Teilchen:

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

- Photon im Vakuum:

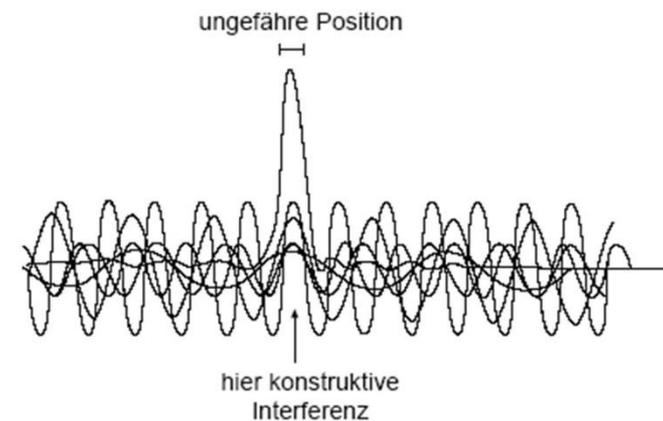
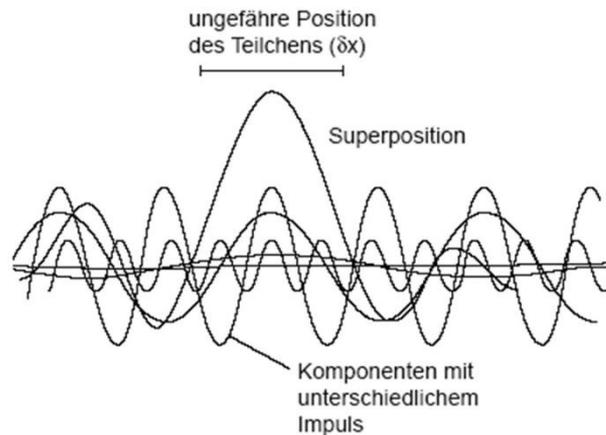
$$v_{Ph} = c$$

Wellenpakete

■ Superposition ebener Wellen für lokalisiertes Teilchen

■ Viele verschiedene Frequenzen

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

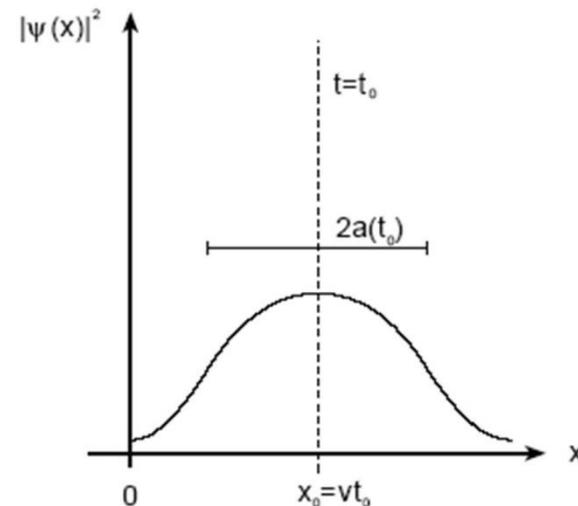
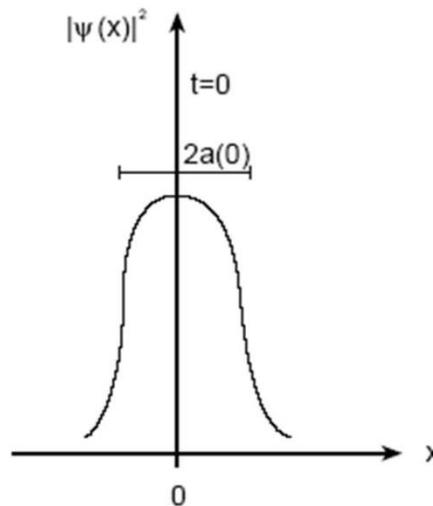


■ Fouriertransformation: Impulsraum \longleftrightarrow Ortsraum

<https://phet.colorado.edu/de/simulation/fourier>

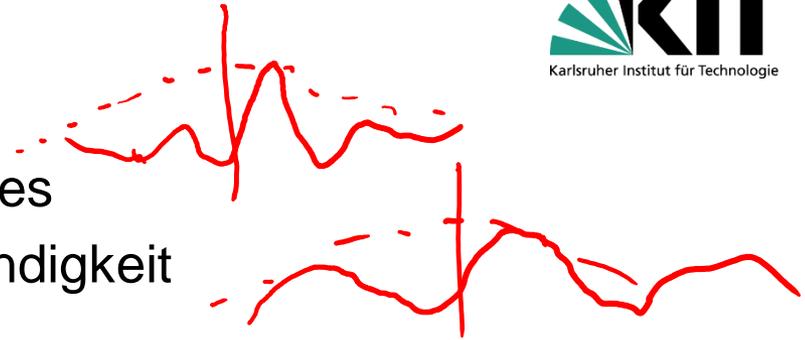
Dispersion von Wellenpaketen

- 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:

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

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

https://www.youtube.com/watch?annotation_id=annotation_2326273631&feature=iv&src_vid=v9DPzMoWpc0&v=tIM9vq-bepA
http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/1/pc/pc_11/pc_11_01/pc_11_01_01.vlu/Page/vsc/de/ch/1/pc/pc_11/pc_11_01/pc_11_01_07.vscml.html

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.

$$W = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m_e} = 2,41 \text{ fJ} = 15,04 \text{ keV}$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = 15,04 \text{ keV}$$

A1 b) Das freie Elektron

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

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

■ Photonen:

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

■ Elektronen:

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

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 $\langle \hat{p}^2 \rangle$: $\hat{p} \hat{p} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

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

- 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:

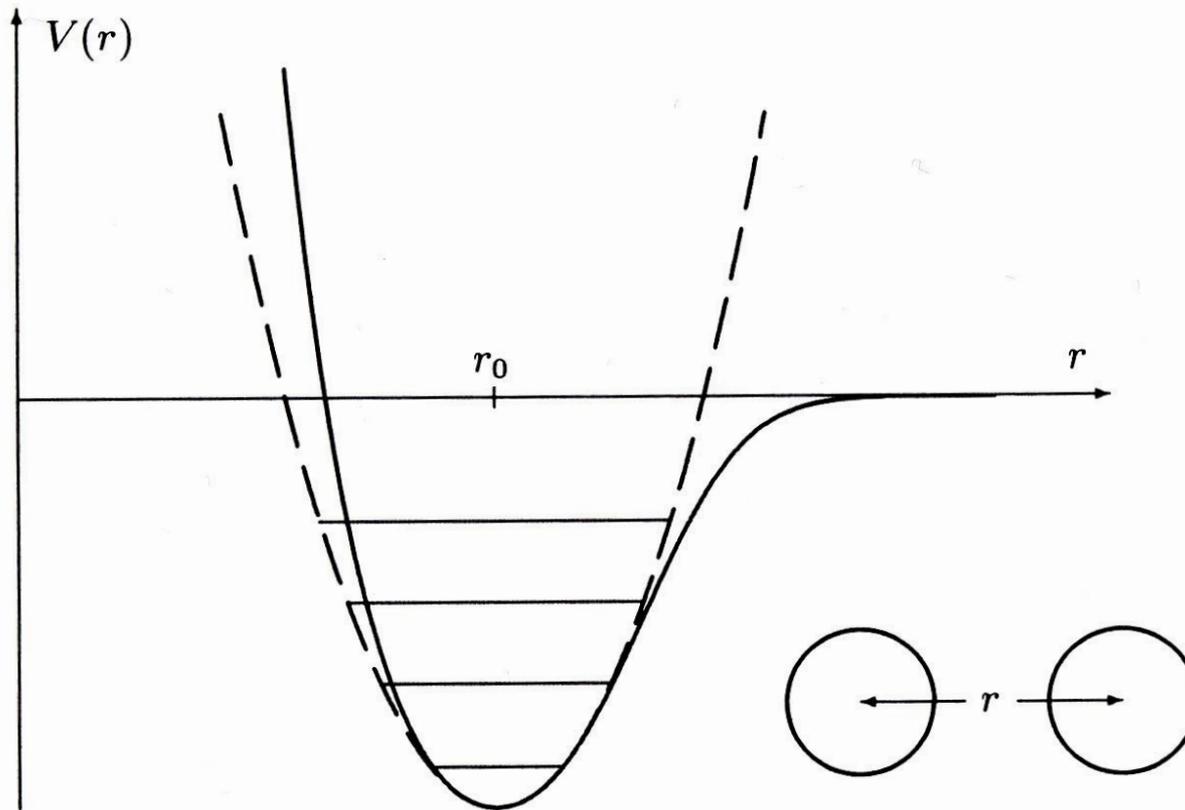
$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$



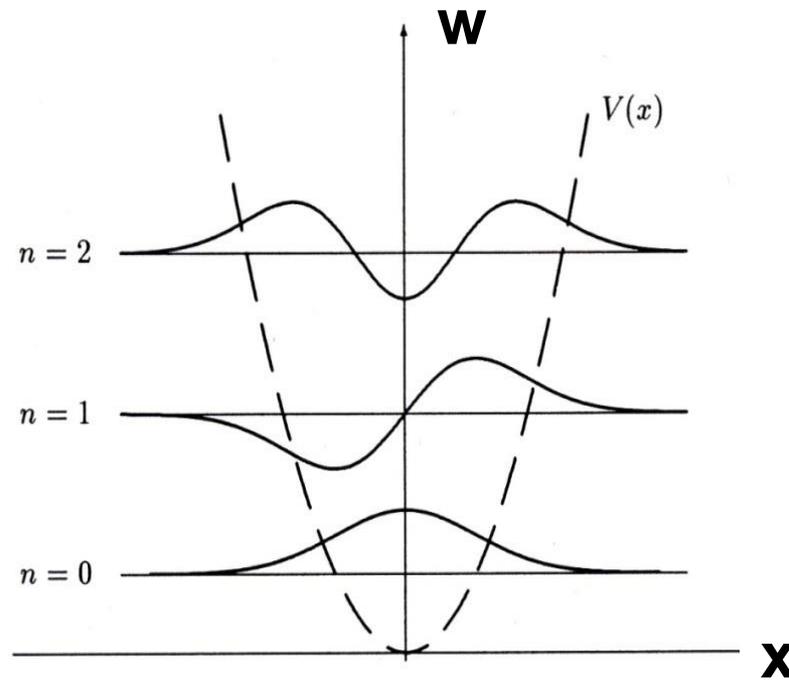
$$\Delta x \rightarrow \infty$$

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:

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

Hermitesche Polynome

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

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

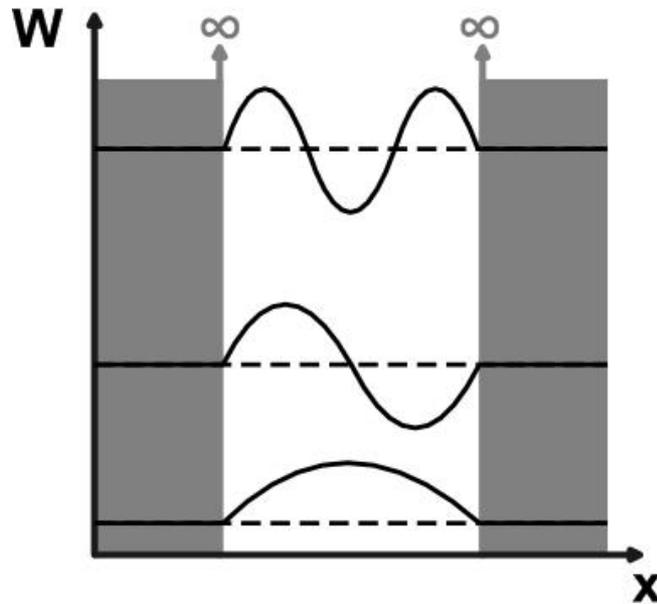
Mit $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und $H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2)$

■ Eigenwerte:

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

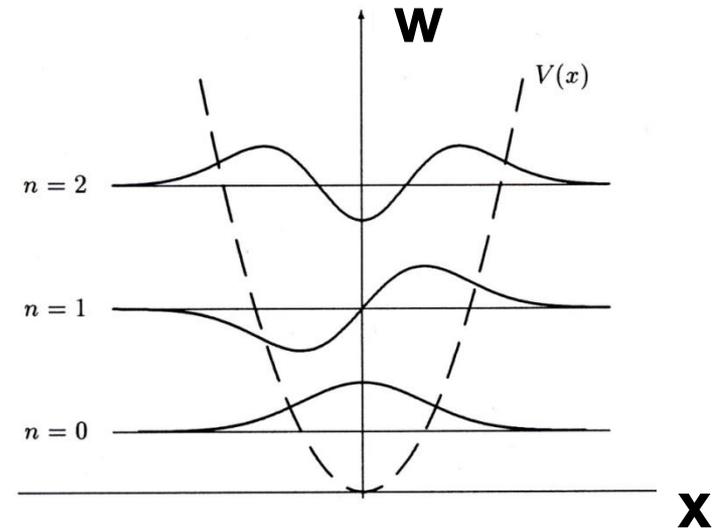
$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

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

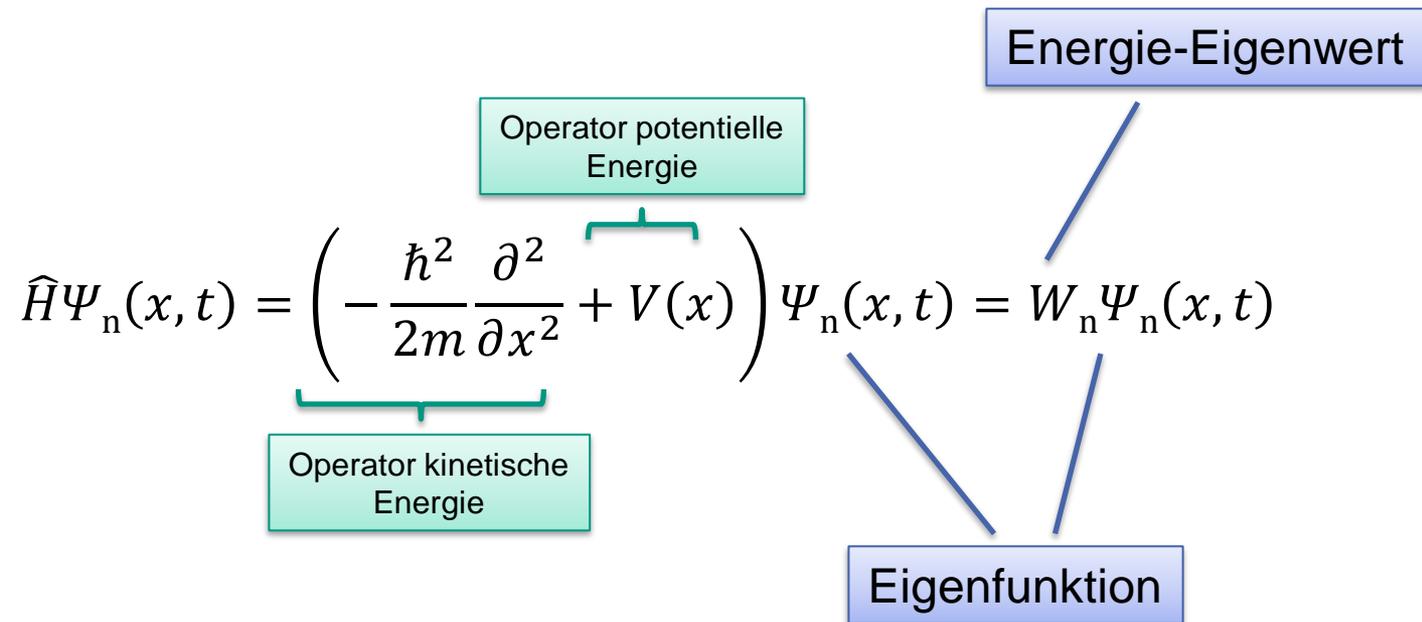
- $W_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$
- Diskrete Energieeigenwerte
- Äquidistante Energieeigenwerte

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

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

A2 c) Parabolisches Potential

- Allgemeines Vorgehen:

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


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 $\frac{\hbar\omega}{2}$

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

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

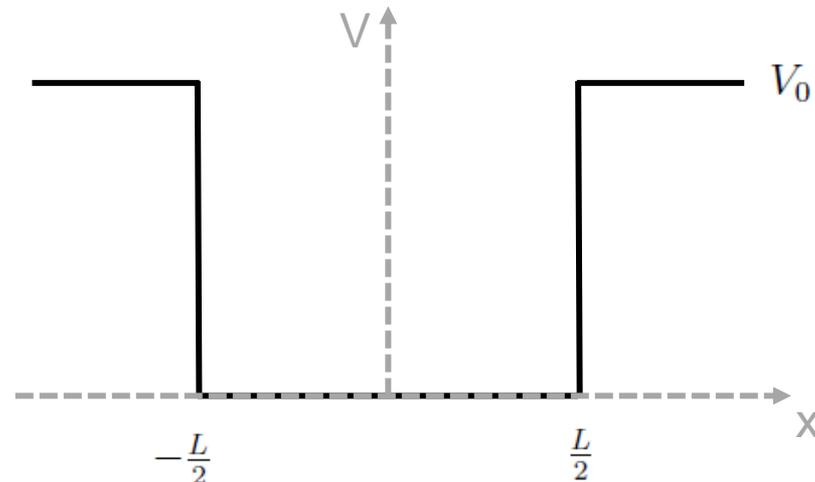
A3 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

Gegeben sei das Potential

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

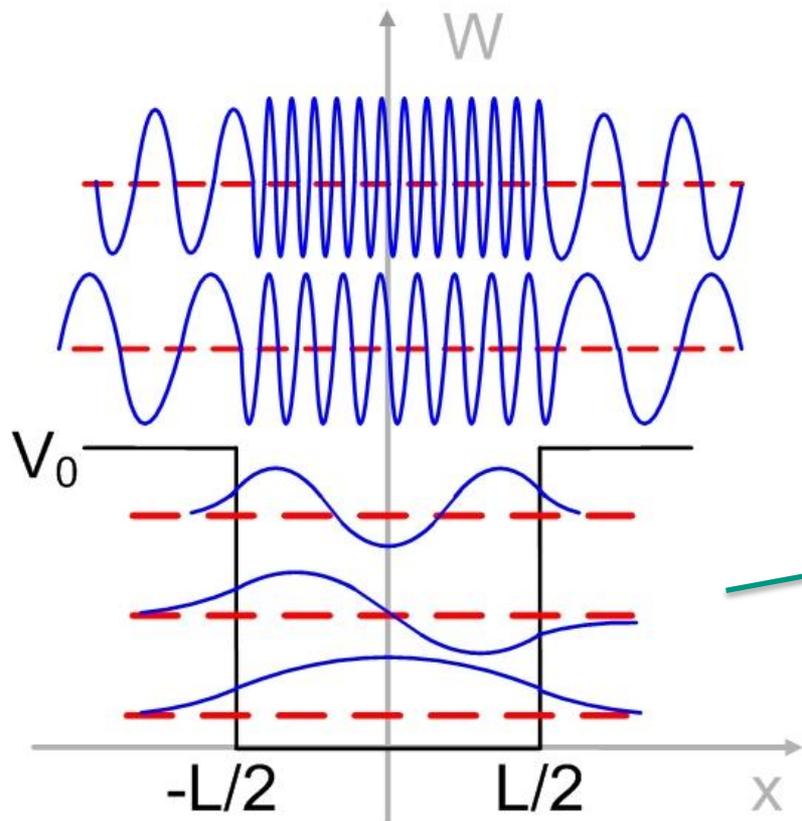
eines endlichen Potentialtopfes der Tiefe V_0 .

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:

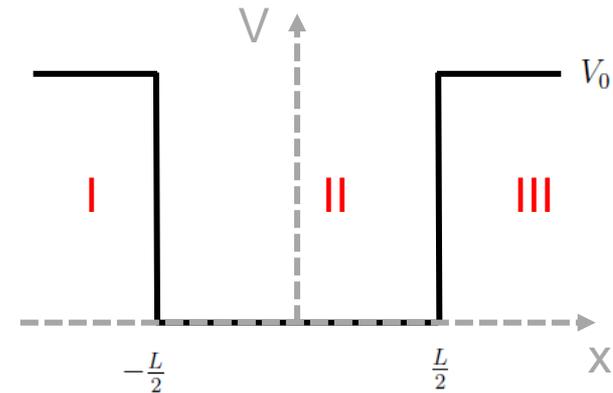
- diskrete Energien
- räumlich begrenzt

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:

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



■ Allgemeiner 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

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

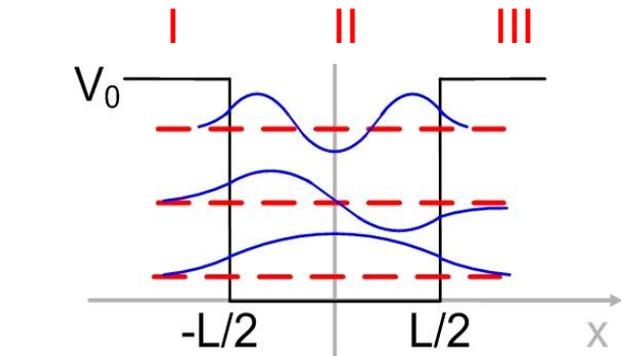
■ Exponentielles Abklingen in Barriere

$$A = 0$$

(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:

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

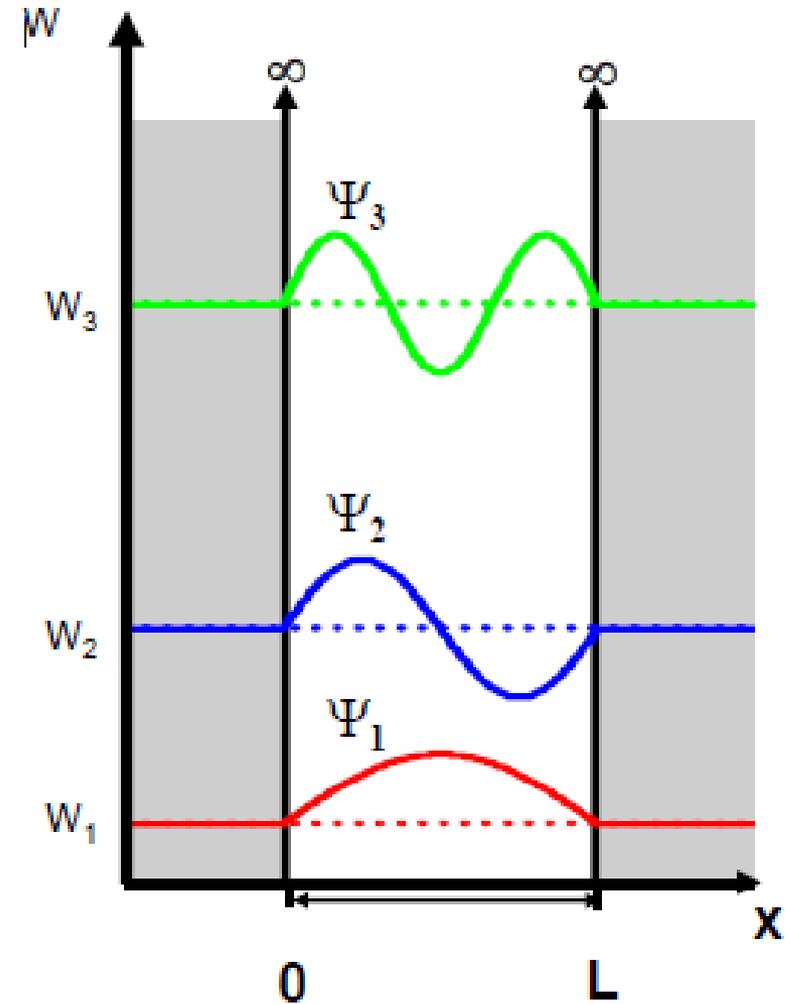
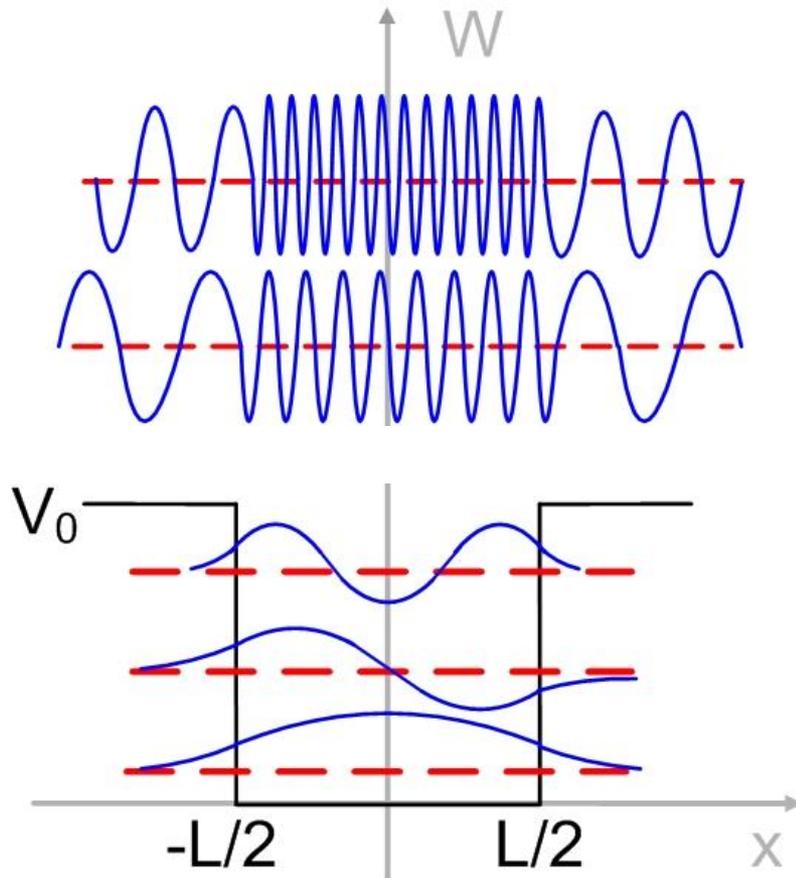
$$2: \quad B(\kappa_1) \exp(-\kappa_1 L/2) = D(-jk_2) \exp(+jk_2 L/2) + C(jk_2) \exp(-jk_2 L/2)$$

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

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

<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:

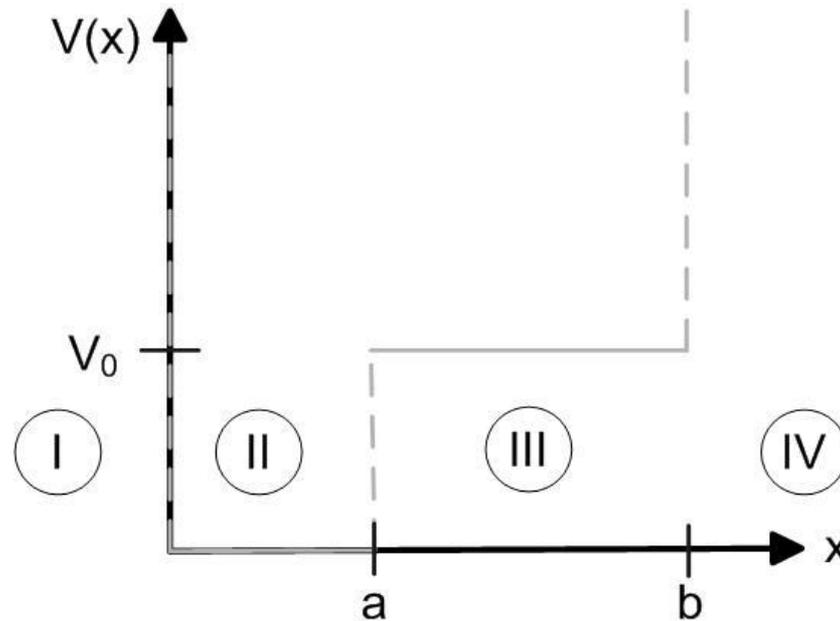
$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 & \text{Bereich I} \\ 0 & : 0 \leq x < a & \text{Bereich II} \\ V_0 & : a \leq x < b & \text{Bereich III} \\ \infty & : x \geq b & \text{Bereich IV} \end{cases}$$

Skizzieren Sie den Potentialverlauf!

A4 a) Stückweise konstantes Potential

- Gegeben sei das Potential:

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



A4 b) Stückweise konstantes Potential

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

■ Bereich I & IV

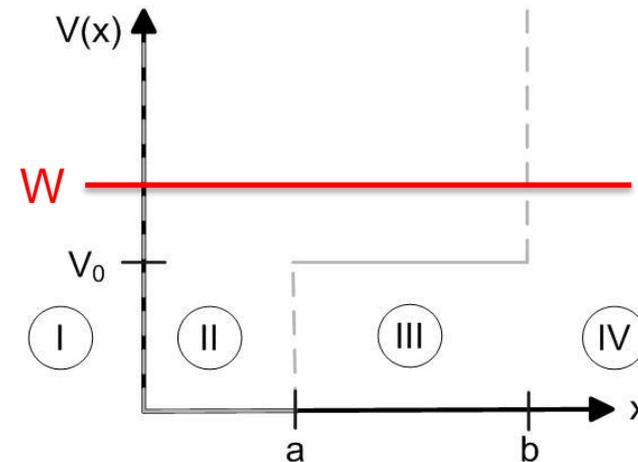
$$\Psi_1(x) = \Psi_4(x) = 0$$

■ 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 $W > V_0$

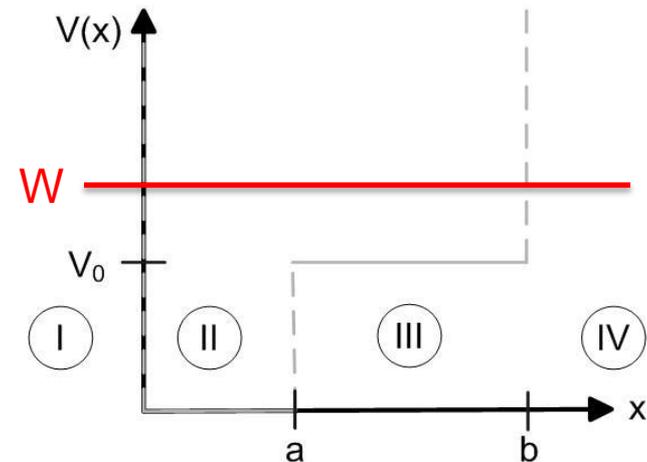
■ Randbedingungen:

$$\Psi_2(0) = 0$$

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

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

$$\Psi_3(b) = 0$$

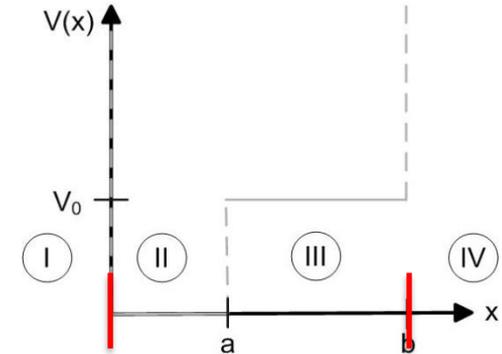


■ 4 unabhängige Gleichungen & 4 Konstanten:
 → lösbares Gleichungssystem

A4 b) Stückweise konstantes Potential

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

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

 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

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

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

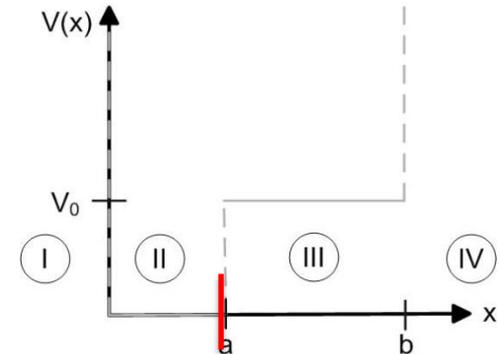
$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \rightarrow$$

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

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

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

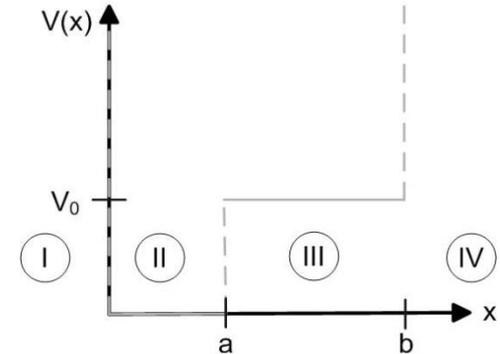
$$\frac{1}{k_2} \tan(k_2 a) = \frac{1}{k_3} \tan(k_3(a - b))$$



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:

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

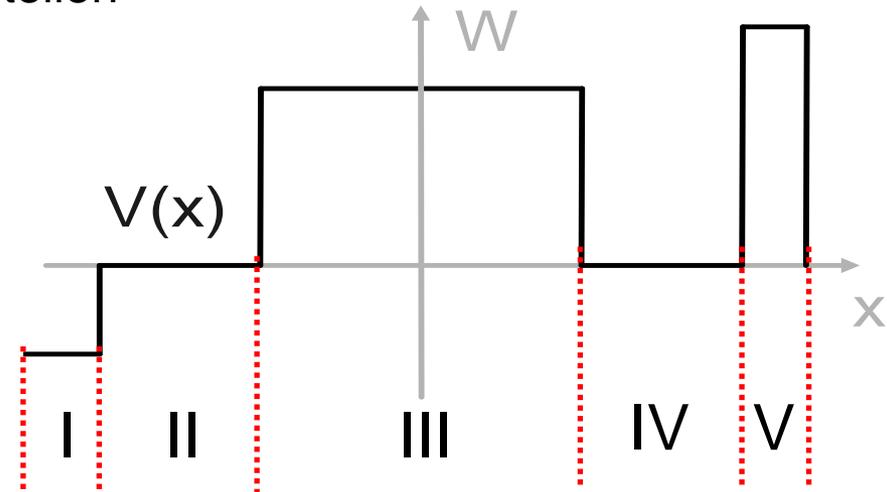
4. **Rand- und Nebenbedingungen** aufstellen

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

■ Nächste Tutorien: 25.05. – 29.05.2020

■ Nächste Vorlesung: 22. Mai 2020

■ Nächste Übung (Ü4): 29. Mai 2020