

### Zeitabhängige 3-dimensionale Schrödinger-Gleichung

$$i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad \text{mit} \quad \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t)$$

### Zeitunabhängige 1-dimensionale Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad \text{mit} \quad \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \psi(x)$$

Gesamtwellenfunktion

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \cdot e^{-i \cdot \omega_n \cdot t}$$

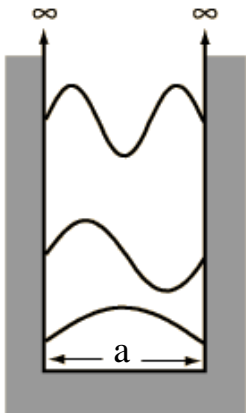


Erwin Schrödinger  
(1887 - 1961)

### Anwendungsbeispiele

a) Unendlich hoher Potenzialtopf mit Breite  $a$  (siehe 7.12.2013)

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(k_n \cdot x) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t} \quad \text{mit} \quad k_n = n \frac{\pi}{a} \quad \text{und} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 \quad n = 1, 2, 3 \dots$$



Analogie zu einer schwingenden Saite. aber:

- Zeitabhängigkeit komplex
- Amplitude durch Normierung der Wellenfunktion festgelegt
- Energie quantisiert
- der niedrigste Zustand hat Energie  $\neq 0$ , sogenannte **Nullpunktsenergie**, kompatibel mit der Unschärferelation (zur Erinnerung: der genaue Wert auf der rechten Seite hängt von der Definition der Breite ab)

$$n = 1: \quad \Delta x \cdot \Delta p = a \cdot \hbar \cdot k_1 = a \cdot \hbar \cdot \frac{\pi}{a} = \frac{h}{2}$$

$$\hat{H}\psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Die Eigenfunktionen haben Eigenschaften, die man auch bei anderen Potenzialen in ähnlicher Weise findet:

- quantenmechanische **Zustände**, und zwar ein **Grundzustand** ( $n = 1$ ) und **angeregte Zustände**
- $n - 1$  **Knoten** (Nulldurchgänge ohne Berücksichtigung der Endpunkte)
- abwechselnd **gerade** und **ungerade** bzgl. der Mitte des Potenzialtopfs
- **orthogonal** und **vollständig**

"orthogonal": Skalarprodukt = 0 für verschiedene, = 1 für gleiche Zustände

für  $m = n$ :  $\cos(0) = 1$

$$\begin{aligned} \langle \psi_m(x) | \psi_n(x) \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m \cdot \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} x\right) \cdot dx = \frac{1}{a} \int_0^a \cos\left(\frac{(m-n) \cdot \pi}{a} x\right) - \cos\left(\frac{(m+n) \cdot \pi}{a} x\right) \cdot dx \\ &= \frac{1}{(m-n) \cdot \pi} \sin\left(\frac{(m-n) \cdot \pi}{a} x\right) - \frac{1}{(m+n) \cdot \pi} \sin\left(\frac{(m+n) \cdot \pi}{a} x\right) \Bigg|_0^a = 0 \quad \text{für } m \neq n \end{aligned}$$

$$\langle \psi_m(x) | \psi_n(x) \rangle = \delta_{mn}$$

Kronecker-Delta: 0 für  $m \neq n$ , 1 für  $m = n$

"vollständig": jede Wellenfunktion  $f(x)$  lässt sich als Linearkombination der Eigenfunktionen darstellen.

In diesem Fall ist dies die Fourier-Reihe von  $f(x)$ .

$$|f(x)\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} x\right)$$

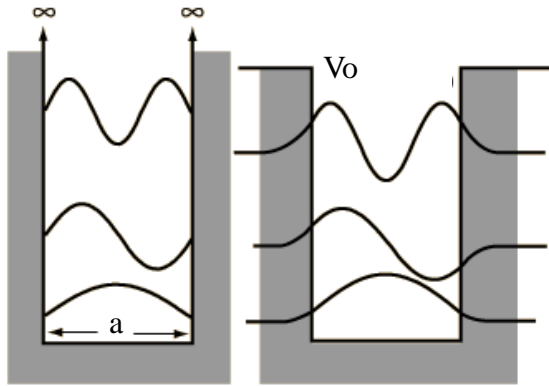
$$\langle \psi_m(x) | f(x) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} x\right) \cdot dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \delta_{mn} = c_m$$

Erwartungswert der Energie einer aus Eigenfunktionen "zusammengesetzten" Wellenfunktion

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi \cdot dx = \int \left( \sum_n c_n \cdot \psi_n \right)^* \cdot \hat{H} \left( \sum_n c_n \cdot \psi_n \right) \cdot dx = \sum_n c_n^* \cdot c_n \int \psi_n^* \cdot E_n \cdot \psi_n \cdot dx$$

$$\rightarrow \langle E \rangle = \sum_n |c_n|^2 \cdot E_n$$

## b) Endlich tiefer Potenzialtopf



Die Werte von  $k$  und  $q$  und die damit verbundenen Energiewerte müssen **numerisch oder durch grafische Lösung** gefunden werden. Die Wellenfunktionen der **gebundenen Zustände** (unter dem Rand des Topfes) haben gequantelte Energien und sind denen des unendlich hohen Topfes ähnlich, aber nicht identisch. Sie dringen exponentiell abnehmend in die Wand ein. Die Energien der Wellenfunktionen der **ungebundenen Zustände** (über dem Rand) sind nicht gequantelt.

$$V(x) = -V_0 \quad \text{für} \quad -a/2 \leq x \leq a/2$$

$$V(x) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad |x| > a/2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} - V_0 \cdot \psi_I(x) = E \cdot \psi_I(x) \quad \text{für} \quad |x| < a/2 \equiv b$$

**innerhalb des Topfes**

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} + k^2 \cdot \psi_I(x) = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) > 0$$

$$\psi_I(x) = A \cdot \cos(k \cdot x) \quad \text{betrachte zunächst gerade Funktionen}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = E \cdot \psi_{II}(x) \quad \text{für} \quad x > b \quad \text{außerhalb des Topfes}$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + q^2 \cdot \psi_{II}(x) = 0 \quad \text{mit} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E < 0$$

$$\psi_{II}(x) = B \cdot e^{-q \cdot x} \quad \text{exponentiell abklingende Wellenfunktion}$$

Stetigkeit von  $\psi$  und  $\psi'$  am Rand des Topfes führt zu

$$A \cdot \cos(k \cdot b) = B \cdot e^{-q \cdot b} \quad \text{und} \quad -A \cdot k \cdot \sin(k \cdot b) = -B \cdot q \cdot e^{-q \cdot b}$$

$$\tan(k \cdot b) = q / k$$

für gerade Funktionen

$$\cot(k \cdot b) = -q / k$$

für ungerade Funktionen (analoge Herleitung)

**c) Potenzialstufe**

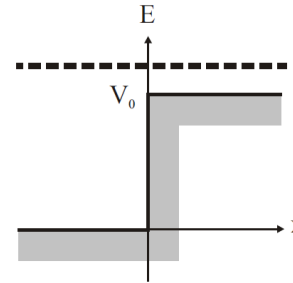
I)  $V(x) = 0$  für  $x < 0$

II)  $V(x) = V_0 > 0$  für  $x \geq 0$

Allgemeiner Ansatz

I)  $\psi_I(x) = A \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}$

II)  $\psi_{II}(x) = C \cdot e^{\alpha \cdot x} + D \cdot e^{-\alpha \cdot x}$



Schrödinger-Gleichung in Gebiet II ergibt:

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot \psi_{II} = \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \alpha^2 \cdot \psi_{II} = 0 \quad \text{mit} \quad \alpha \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)}$$

Je nach Vorzeichen von  $\alpha$  oszilliert die Wellenfunktion oder sie klingt exponentiell ab.

Bei  $x = 0$  muss die Wellenfunktion stetig und differenzierbar sein (sonst gäbe es die 2. Ableitung nicht).

Daher gilt:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \rightarrow \quad A + B = C + D$$

$$\frac{\partial \psi_I(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}(0)}{\partial x} \quad \rightarrow \quad i \cdot k \cdot (A - B) = \alpha \cdot (C - D)$$

**2 Fälle:**

(i) **Energie  $E > V_0$  (Energie über der Potenzialstufe)**

Welle wird reflektiert oder bewegt sich mit veränderter Frequenz bzw. Wellenzahl weiter.  $C = 0$ , weil sich die Welle jenseits der Stufe nur in positive  $x$ -Richtung bewegt.

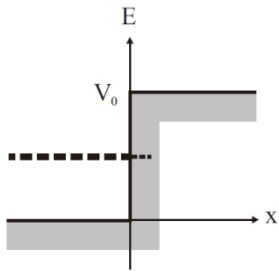
$$k' = i \cdot \alpha \quad \rightarrow \quad \psi_{II} = D \cdot e^{i \cdot k' \cdot x} \quad (C = 0)$$

$$A - B = \frac{-i \cdot k'}{i \cdot k} (-D) \quad \rightarrow \quad D = \frac{k}{k'} (A - B) = A + B$$

$$A \cdot \left( \frac{k}{k'} - 1 \right) = A \cdot \frac{k - k'}{k'} = B \cdot \left( 1 + \frac{k}{k'} \right) = B \cdot \frac{k' + k}{k'} \quad \rightarrow \quad B = \frac{k - k'}{k + k'} \cdot A \quad D = \frac{2k}{k + k'} \cdot A$$

$$\psi_I = A \cdot \left( e^{i \cdot k \cdot x} + \frac{k - k'}{k + k'} \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} \right) \quad \text{und} \quad \psi_{II} = A \cdot \frac{2k}{k + k'} \cdot e^{-i \cdot k' \cdot x} \quad k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (E - V_0)}$$

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik für Teilchen wird, wie in der Optik, ein Teil der Welle reflektiert.  
 Reflexions- und Transmissionskoeffizient:



$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 \quad \text{und} \quad T = 1 - R$$

$$T = \frac{v'}{v} \cdot \frac{|D|^2}{|A|^2} = \frac{k'}{k} \cdot \frac{|D|^2}{|A|^2} = \frac{4k \cdot k'}{(k + k')^2}$$

(ii) Energie  $E < V_0$  (Energie unter der Potenzialstufe)

( $C = 0$ )

$C = 0$ , weil die Welle jenseits der Stufe nicht exponentiell anwachsen, sondern nur gedämpft werden kann.

$$i \cdot k \cdot (A - B) = \alpha \cdot (-D) \quad \rightarrow \quad D = -\frac{i \cdot k}{\alpha} (A - B) = A + B$$

$$A \cdot \left( \frac{i \cdot k}{\alpha} + 1 \right) = A \cdot \frac{i \cdot k + \alpha}{\alpha} = B \left( \frac{i \cdot k}{\alpha} - 1 \right) = B \cdot \frac{i \cdot k - \alpha}{\alpha} \quad \rightarrow \quad B = \frac{i \cdot k + \alpha}{i \cdot k - \alpha} \cdot A \quad D = \frac{2i \cdot k}{i \cdot k - \alpha} \cdot A$$

$$\psi_{\text{I}} = A \cdot \left( e^{i \cdot k \cdot x} + \frac{i \cdot k + \alpha}{i \cdot k - \alpha} \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} \right) \quad \text{und} \quad \psi_{\text{II}} = A \cdot \frac{2i \cdot k}{i \cdot k - \alpha} \cdot e^{-\alpha \cdot x} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)}$$

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik für Teilchen kann die Welle in die Wand eindringen. Vgl. Totalreflexion in der Optik: die reflektierte Welle dringt in das Medium jenseits der Grenzfläche ein.

Die 1/e-Eindringtiefe ist  $1/(2 \alpha)$ . Reflexionskoeffizient:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{i \cdot k + \alpha}{i \cdot k - \alpha} \right|^2 = 1 \quad \text{und} \quad T = 0$$