

AN)

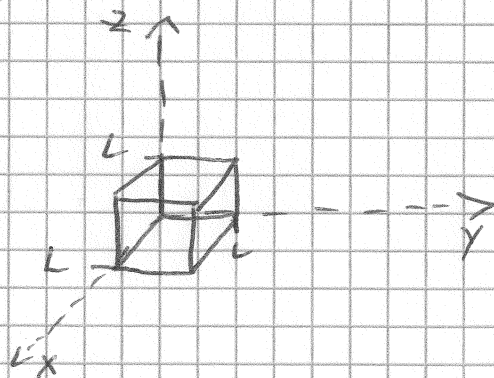
- V ist nicht zeitabhängig, die Gesamtenergie E ist also hier erhalten:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi = E\Psi$$

- Die Randbedingungen werden durch das Kastenpotential gegeben:

$$\Psi(\vec{x}_0, t) = 0 \text{ für } V(\vec{x}_0) \rightarrow \infty,$$

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x_i \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$



- Da das Potential nicht zeitabhängig ist, wählen wir für $\Psi(\vec{x}, t)$ einen Produktansatz:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) \Psi(t) = C_0 e^{-i\vec{k}\vec{x}} e^{-iEt/\hbar}$$

- Die Randbedingungen fließen nun in $\vec{k}$ ein, denn:

$$\vec{k} = 2\pi \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_x} \\ \frac{1}{\lambda_y} \\ \frac{1}{\lambda_z} \end{pmatrix}, \quad L = \frac{n}{2} \lambda$$

$$\Leftrightarrow \vec{k} = \frac{\pi}{L} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$$

• Einsetzen:

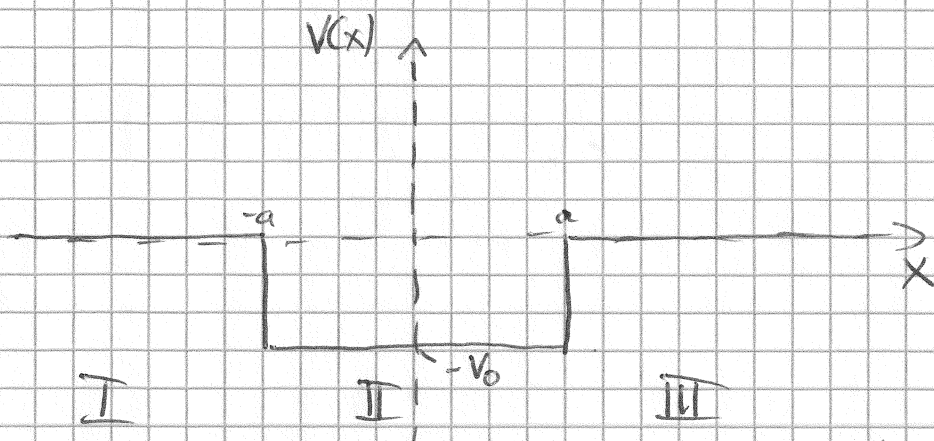
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V\right) \psi = E \psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 \psi + 0 \cdot \psi = E \psi$$

$$\Leftrightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} \quad \text{Zustände: } (n_x, n_y, n_z)$$

b) Energieniveau	Kombinationen	Entartung
$3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$	(1, 1, 1)	1
$6 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$	(2, 1, 1) (1, 2, 1) (1, 1, 2)	3
$10 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$	(2, 2, 1) (2, 1, 2) (1, 2, 2)	3
$14 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$	(3, 1, 1) (1, 3, 1) (3, 1, 1)	3

A20)
$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & , |x| \leq a \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}, a \in \mathbb{R}, a > 0$$



- Es ist zu erwarten, dass „Streu Zustände“ mit $E > 0$ und gebundene Zustände mit $E < 0$ existieren.

- Wegen achsensymmetrischem Potential ist auch ein symmetrisches $|\Psi|^2$ zu erwarten:

↳ gerade Zustände: $\Psi(x) = \Psi(-x)$
 ↳ ungerade Zustände: $-\Psi(x) = \Psi(-x)$
 erfüllen dies.

- Die Schrödingergleichung liefert:

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

$$\Leftrightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = -\left(\frac{E - V}{\hbar^2}\right) \cdot 2m \Psi$$

↳
$$\Psi'' = \begin{cases} -\frac{E + V_0}{\hbar^2} 2m \Psi, & |x| \leq a \\ -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi, & |x| > a \end{cases}$$

Bemerkung: Zustände mit $E \leq -V_0$ machen keinen Sinn.

$$\Rightarrow \text{gerade: } \begin{aligned} C_2 \cos(k_2 a) - C_1 e^{-k_1 a} &= 0 \\ -C_2 k_2 \sin(k_2 a) + C_1 k_1 e^{-k_1 a} &= 0 \end{aligned}$$

Es existieren nichttriviale Lösungen von C_1, C_2 für dieses System, wenn:

$$\det \begin{pmatrix} \cos(k_2 a) & -e^{-k_1 a} \\ -k_2 \sin(k_2 a) & k_1 e^{-k_1 a} \end{pmatrix} = 0$$

$$\Leftrightarrow \cos(k_2 a) k_1 e^{-k_1 a} - k_2 \sin(k_2 a) e^{-k_1 a} = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sin(k_2 a)}{\cos(k_2 a)} = \boxed{\frac{k_1}{k_2} = \tan(k_2 a)} \quad \begin{array}{l} \text{Bedingung an} \\ \text{gerade Bindungszustände.} \end{array}$$

$$\text{ungerade analog: } \begin{aligned} C_2 \sin(k_2 a) + C_1 e^{-k_1 a} &= 0 \\ k_2 C_2 \cos(k_2 a) - C_1 k_1 e^{-k_1 a} &= 0 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow -\sin(k_2 a) k_1 e^{-k_1 a} - k_2 \cos(k_2 a) e^{-k_1 a} = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\cos(k_2 a)}{\sin(k_2 a)} = \boxed{\frac{k_1}{k_2} = -\cot(k_2 a)} \quad \begin{array}{l} \text{Bedingung an} \\ \text{ungerade Bindungszustände.} \end{array}$$

• Diese Bedingungen an die Energieeigenwerte können wir nun graphisch auswerten. Dazu wählen wir: $z := k_2 a = \sqrt{\frac{E + V_0}{\hbar^2}} 2m a$ } Da wir uns für $E < -V_0$ interessieren: $z \in \mathbb{R}$

$$\Leftrightarrow \frac{z^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0 = E$$

$$\begin{aligned} \text{gerade: } \underbrace{\tan(z)}_{\in \mathbb{R}} &= \frac{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E(z)} a}{z} \\ \text{ungerade: } \underbrace{\cot(z)}_{\in \mathbb{R}} &= -\frac{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E(z)} a}{z} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \text{gerade: } \tan(z) &= \frac{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E(z)} a}{z} \\ \text{ungerade: } \cot(z) &= -\frac{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E(z)} a}{z} \end{aligned}} \right\} \begin{array}{l} \text{hier also} \\ \text{nur Realteil} \\ \text{betrachten} \end{array}$$

• um Formen:

Da wir uns für Bindungszustände mit $E < 0$ interessieren, machen wir außerhalb des Potentialtopfes den Ansatz:

gerade: $\psi_{I,IIg}(x) = C_1 e^{-k_1 |x|}$

ungerade: $\psi_{I,IIu}(x) = \begin{cases} -C_1 e^{-k_1 x}, & x > a \\ C_1 e^{k_1 x}, & x < -a \end{cases}$

Mit diesem Ansatz erreichen wir das Abdämpfen von ψ für $|x| \rightarrow \infty$ auf 0.

Innerhalb des Topfes ($|x| \leq a$) wählen wir den Ansatz einer harmonischen Welle:

$$\psi_{II}(x) = A e^{ik_2 x} + B e^{-ik_2 x}$$

↳ gerade: $\psi_{IIg}(x) = A \cos(k_2 x) + B \cos(-k_2 x) = (A+B) \cos(k_2 x) = C_2 \cos(k_2 x)$

ungerade: $\psi_{IIu}(x) = A \sin(k_2 x) + B \sin(-k_2 x) = (A-B) \sin(k_2 x) = C_2 \sin(k_2 x)$

• Einsetzen in $\psi''(x) = \begin{cases} -\frac{E+V_0}{\hbar^2} 2m \psi, & |x| \leq a \\ -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi, & |x| > a \end{cases}$

Liefert: $k_1 = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, k_2 = \sqrt{\frac{E+V_0}{\hbar^2} 2m}$

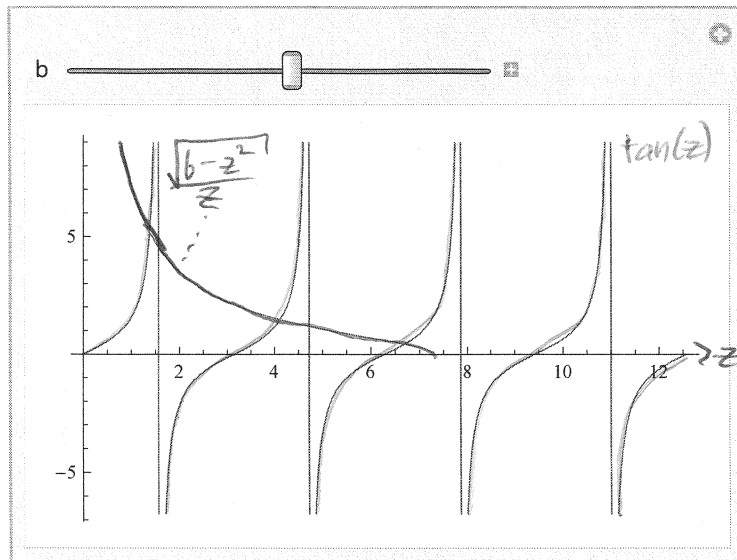
• Nun müssen wir sicherstellen, dass $\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$ und $\psi'_{II}(a) = \psi'_{I,II}(a)$. Durch die Symmetriebedingung ist dies dann auch für $x = -a$ der Fall.

$$\tan(z) = \frac{\sqrt{\frac{z^2}{a^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2}}}{z} = \frac{\sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - z^2}}{z}, \quad z \neq 0$$

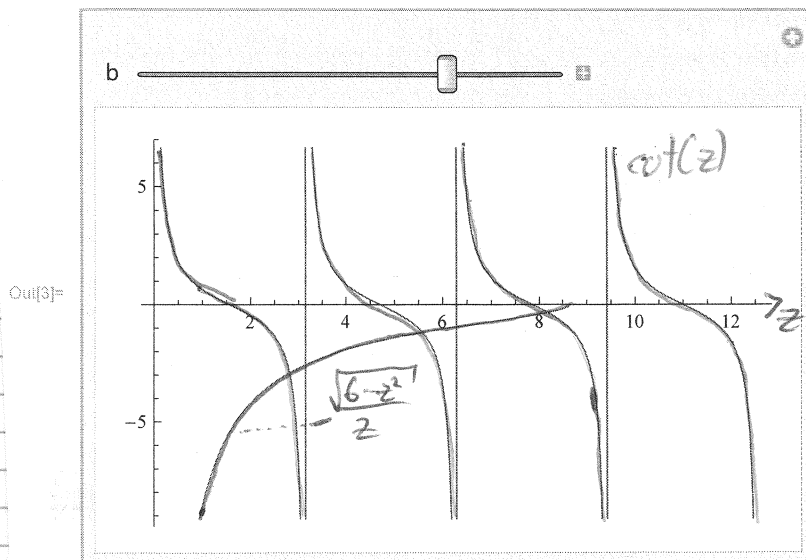
mit: $b := \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$: • $\tan(z) = \frac{\sqrt{b - z^2}}{z}$
 • $\cot(z) = -\frac{\sqrt{b - z^2}}{z}$

Die Grafiken mit Mathematica dargestellt:

In[2]:= Manipulate[Plot[{Tan[z], Sqrt[b - z^2] / z}, {z, 0, 4 * Pi}], {b, 0, 100}]



In[3]:= Manipulate[Plot[{Cot[z], -Sqrt[b - z^2] / z}, {z, 0, 4 * Pi}], {b, 0, 100}]



- Die Schnittpunkte der Kurven erfüllen die Eigenwertbedingungen der Bindungsenergien.

Man erkennt offensichtlich, dass das kleinste erlaubte z zu einem geraden Zustand gehört. Danach wechseln die Zustände sich ab. Damit nun nur ein ~~ein~~ Bindungszustand existiert, muss das b so gewählt werden, dass beim geraden Zustand genau ein Schnittpunkt, beim ungeraden Zustand kein Schnittpunkt existiert. Der erste Schnittpunkt im ungeraden Fall liegt ~~bei~~ ab:

$$\underbrace{\cot(z_0)}_i = 0 = - \underbrace{\frac{\sqrt{b-z_0^2}}{z_0}}_{ii}, \quad z_0 \neq 0 \quad (\text{wg } E \neq -V, \text{ s. Anfang})$$

$$\Leftrightarrow \text{i) } z_0 = \frac{\pi}{2}, \quad \text{ii) } z_0 = \sqrt{b}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\pi}{2} = \sqrt{b} = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}}$$

- Sobald der Potentialtopf tiefer wird als $-\frac{\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}$, gibt es mehr als einen Bindungszustand!