

Wdhlg: Teilchen im Potenzial $U(\vec{x})$

$$\rightarrow H = \frac{1}{2m} |\hat{\vec{p}}|^2 + U(\hat{\vec{x}})$$

$$\rightarrow \text{S.G.: } i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} |\hat{\vec{p}}|^2 + U(\hat{\vec{x}}) \right) |\psi(t)\rangle$$

$\nwarrow \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2$

im Ortsdst.:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t)$$

Schrödingergleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right)$$

Lösungen:

(I) best. Energieeigenzustände

$$|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, \dots$$

zu Eigenenergien

$$E_0, E_1, \dots$$

anhand Eigenwertgleichung

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad \rightarrow$$

in Ortsdarstellung

(II) bestimme normierte

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

Energieeigenfunktionen:

$$\phi_0(\vec{x}), \phi_1(\vec{x}), \dots \quad (\phi_n|\phi_m) = \delta_{nm}$$

zu $E_0, E_1, \dots$

anhand EW-Gl. in Ortsdarstellung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{x}) \right) \phi(\vec{x}) = E \phi(\vec{x})$$

"stationäre Schrödinger-Gleichung"

3D

$$\Delta \phi(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} (U(\vec{x}) - E) \phi(\vec{x})$$

1D

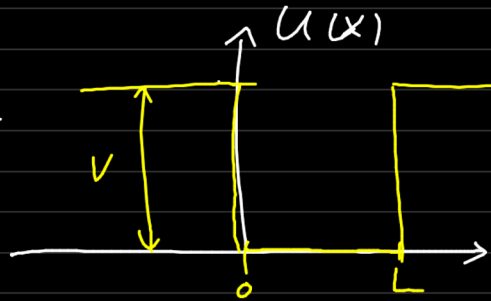
$$\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \phi(x)$$

Modellsysteme:

1) "Teilchen im Kasten":

1D

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ V & \text{sonst} \end{cases}$$



Energieeigenzust. für $0 < E < V$

Stet. SC: $\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E)$

für $x < 0$: $\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \phi(x)$

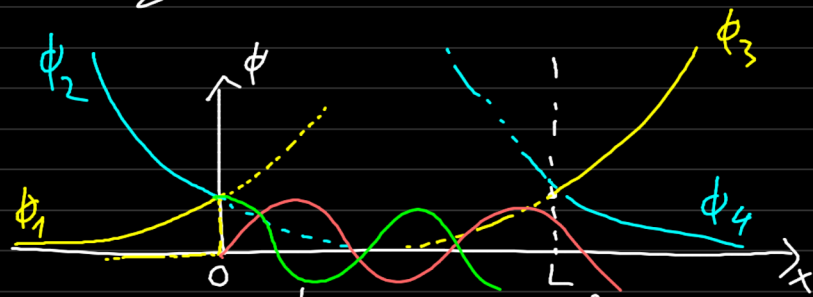
$\underbrace{\hspace{10em}}_{\chi_E^2}$

mit $\chi_E = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$

→ $\phi''(x) = \chi^2 \phi(x)$

→ spez. Lsg en:

$$\phi_{1/2}(x) = 1 \cdot e^{\pm \chi_E x}$$



→ nur ϕ_1 geeignet für
normierbare Eigenfkt!

$x > L$: $\phi''(x) = \chi_E^2 \phi(x)$

spez. Lsg. $\phi_{3/4}(x) = 1 e^{\pm x_E(x-L)}$

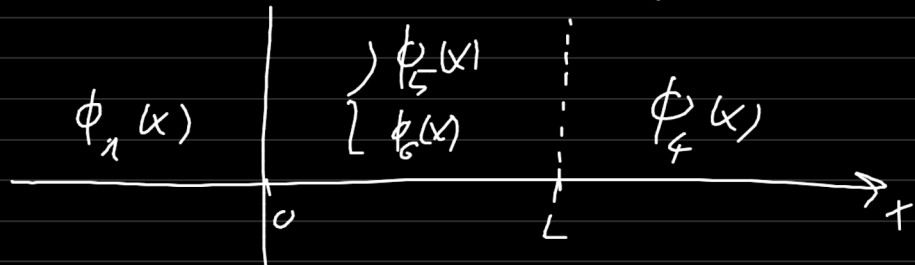
nun $\phi_4(x)$ geeignet für normierte E.f.

für $0 \leq x \leq L$:

s. SCL: $\phi''(x) = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{h_E^2} \phi(x)$
 mit $h_E = \sqrt{2mE}/\hbar$

$\rightarrow \phi''(x) = -h_E^2 \phi(x)$

$\rightarrow$ spez. Lsg. $\phi_{5/6}(x) = \begin{cases} \cos(h_E x) \\ \sin(h_E x) \end{cases}$



$\hookrightarrow$ Ansatz für globale Lösung
 der st. SCL:

$$\phi(x) = \begin{cases} \underline{a} \phi_1(x) = \underline{a} e^{\underline{x_E} x} & : x < 0 \\ \underline{b} \cos(h_E x) + \underline{c} \sin(h_E x) & : 0 \leq x \leq L \\ \underline{d} \phi_4(x) = \underline{d} e^{-\underline{x_E} x} & : x > L \end{cases}$$

freien Parameter E, a, b, c, d bestimmt
durch (i) Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$

Stetigkeit von $\phi(x)$ und $\phi'(x)$; insb. bei $x=0, L$

$$(ii) \quad \phi(0-\varepsilon) \stackrel{!}{=} \phi(0+\varepsilon)$$

$$(iii) \quad \phi'(0-\varepsilon) \stackrel{!}{=} \phi'(0+\varepsilon)$$

$$(iv) \quad \phi(L-\varepsilon) = \phi(L+\varepsilon)$$

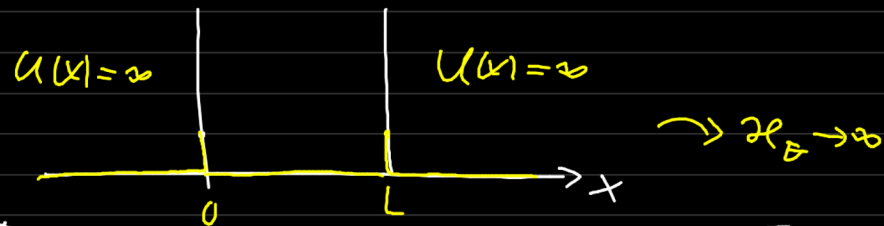
$$(v) \quad \phi'(L-\varepsilon) = \phi'(L+\varepsilon)$$

5 Gleichungen für 5 Parameter

→ diskrete Eigenenergien

$$E_0, E_1, E_2, \dots$$

Vereinfachung: $V \rightarrow +\infty$!!



$$\boxed{\phi(x) = 0 \text{ für } x < 0, x > L !}$$

$$\rightarrow \phi(x) = b \cdot \cancel{\cos(k_E x)} + c \sin(k_E x)$$

$$\text{so, dass } \phi(0) = \phi(L) = 0 !$$

$$\rightarrow b = 0, \quad \sin(k_E \cdot L) \stackrel{!}{=} 0$$

erfüllt für

$$k_E = \frac{\pi}{L} \cdot n =: k_n$$

$n \in \mathbb{N}$

$\rightarrow$ Quantisierung der Wellenzahl:

$$k = k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n !$$

$$(k_E = \sqrt{2mE})/h$$

$\rightarrow$ Quantisierung der Energie:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} \cdot n^2$$

$$k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n, \quad n \in \mathbb{N}$$

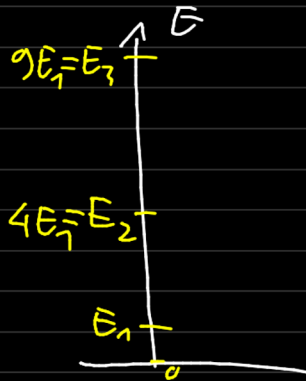
also:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}$$

$$E_2 = E_1 \cdot 4$$

$$E_3 = 9 E_1$$

$\vdots$

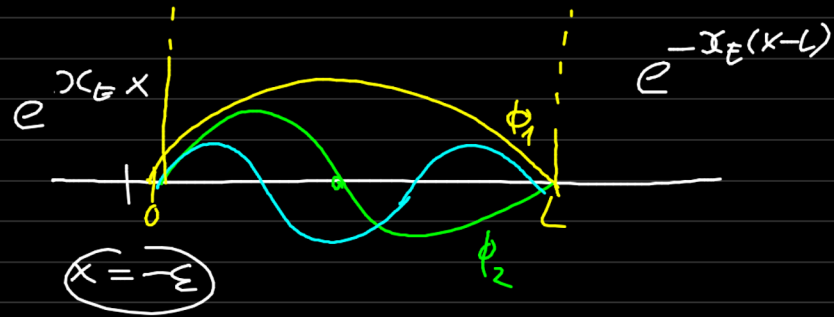
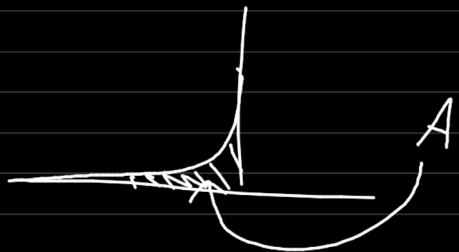


→ Energieeigenfunktionen: $k_n = \frac{\pi}{L} n$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) \quad \text{für } x \in [0, L] \\ (=0 \text{ für } x \notin [0, L])$$

$$\int_0^L dx \frac{2}{L} \sin^2(k_n x) = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{2}{L} \cdot 1 dx = 1 \quad \checkmark$$

$$\int_0^L dx \frac{2}{L} \cos^2(k_n x)$$



$$\lim_{V \rightarrow \infty} e^{-x_E \cdot \varepsilon} = \lim_{V \rightarrow \infty} e^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \cdot \varepsilon} = 0$$

$$A = \int_{-\infty}^0 e^{+2x_E x} dx = \int_0^{\infty} e^{-2x_E x} dx = \frac{e^{-2x_E x}}{-2x_E} \Big|_0^{\infty}$$

$$= \frac{1}{2\mathcal{E}_E} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V-E_1)}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0!$$

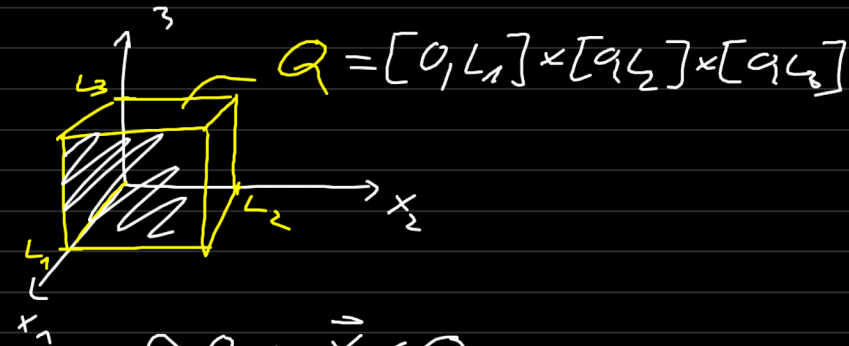
→ allg. Erkenntnis:

Teilchen gebunden im Potential
weist diskrete Energien auf!

"Energiequantisierung!"

1D → 3D:

Teilchen im 3D-Kasten



$$U(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & : \vec{x} \in Q \\ \infty & : \vec{x} \notin Q \end{cases}$$

$\rightarrow$ Lsgen $\phi(\vec{x})$ finden S.C. für $\vec{x} \in Q$:
 $\left. \begin{array}{l} \text{der} \\ \text{für } \vec{x} \in Q: \end{array} \right\} 0 \notin Q$

$\rightarrow$ Lsgen: $\Delta \phi(\vec{x}) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(\vec{x})$ für $\vec{x} \in Q$

mit Randbedingung $\boxed{\phi|_{\partial Q} = 0} \quad (\forall)$

$$\hookrightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \phi(\vec{x}) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(\vec{x})$$

Ansatz: $\phi(\vec{x}) \stackrel{!}{=} \underset{h(x_1, x_2, x_3)}{\sin(h_1 x_1) \sin(h_2 x_2) \sin(h_3 x_3)}$

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \Delta \phi_{\vec{h}}(\vec{x}) = -(h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) \phi_{\vec{h}}(\vec{x})$$

$$\Delta \phi_{\vec{h}}(\vec{x}) = -|\vec{h}|^2 \phi_{\vec{h}}(\vec{x})$$

R.B. (*) erfüllt:

$$h_1 = \frac{\pi}{L_1} n_1, \quad h_2 = \frac{\pi}{L_2} n_2$$

$$h_3 = \frac{\pi}{L_3} n_3; \quad \vec{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{N}$$

$\rightarrow \vec{h} \propto \vec{n}$: quantisierte h -Werte!

→ quantisierte Eigenenergien:

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{\vec{n}}|^2}{2m}$$

(n_1, n_2, n_3)

mit Energieeigenfunktionen:

$$\phi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2^3}{L_1 L_2 L_3}} \cdot \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) \cdot \sin(k_3 x_3)$$