

III) Quantenmechanik

Quantenmechanik ist eine Theorie, die Physik auf sehr kleinen Größenskalen erklären kann. Sie beruht darauf, dass Atome / Moleküle sowohl Teilchencharakter, wie auch Wellencharakter (Interferenz) haben.

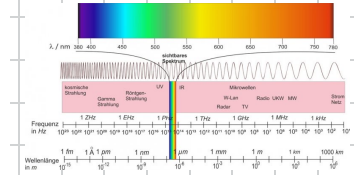
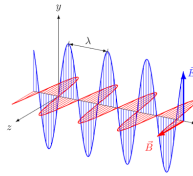
Elektromagnetische Strahlung

Licht ist elektromagnetische Strahlung, welche eine sich im Raum ausbreitende Schwingung des elektromagnetischen Feldes ist. Dabei oszillieren das magnetische Feld \vec{B} und das elektrische Feld \vec{E} senkrecht sowohl zueinander, wie auch zur Ausbreitungsrichtung. Die allgemeine Wellengleichung im Vakuum lautet:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \vec{E}(x, y, z, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial^2 \vec{E}(x, y, z, t)}{\partial t^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \vec{B}(x, y, z, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial^2 \vec{B}(x, y, z, t)}{\partial t^2}$$

Allg. Wellengleichung: $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$



Monochromatisches Licht ist dabei Licht, das nur aus einer Wellenlänge besteht, für welches sich die Wellengleichung für z als Ausbreitungsrichtung leicht lösen lässt mit folgenden Lösungsformeln

$$\vec{E} = E_0 \cos(\omega t - k z) \quad \vec{B} = B_0 \cos(\omega t - k z)$$

Zeitbereich	Ortsbereich
Periode: $T = \frac{2\pi}{\omega}$	Wellenlänge: λ
Frequenz: $\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi}$	Wellenzahl: $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$
Kreisfrequenz: $\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$	Kreiswellenzahl: $k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\tilde{\nu}$

Diese Beschreibung des Lichts folgt aus der klassischen Elektrodynamik (Maxwell Gleichungen) und postuliert Wellencharakter für Licht, welcher auch mit Interferenzexperimenten gezeigt wurde (Doppelspalt).

① Berechnen Sie für jede der folgenden Wellenlängen die Photonenenergie in eV, J und $\frac{kJ}{mol}$. Welcher Spektralbereich entspricht typischen chemischen Bindungsenergien?

Bereich	Wellenlänge	E in J	E in eV	E in $\frac{kJ}{mol}$
UV	250 nm			
Sichtbar	550 nm			
IR	10 μm			

② Das Sonnenspektrum hat sein Intensitätsmaximum $\lambda_{\max} \approx 500 \text{ nm}$. Das Wien'sche Verschiebungsgesetz lautet $\lambda_{\max} \cdot T = b$ mit $b = 2898 \times 10^{-3} \text{ m K}$.

a) Bestimmen Sie die Oberflächentemperatur der Sonne.

b) Bei welcher Wellenlänge strahlt der menschliche Körper ($T \approx 310 \text{ K}$) am stärksten? (Wärmebildkamera)

③ Ein He-Ne-Laser strahlt monochromatisch bei $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ mit einer Leistung von $P = 5.0 \text{ mW}$.

a) Berechnen Sie die Photonenenergie und die Anzahl der Photonen pro Sekunde, die den Laser verlassen.

b) Welche Kraft übt der Laserstrahl auf eine vollständig absorbierende Wand aus? Hinweis: Jedes Photon trägt einen Impuls $p = h/\lambda$.

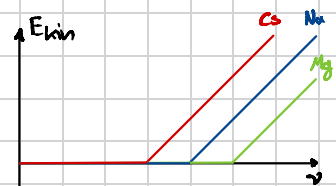
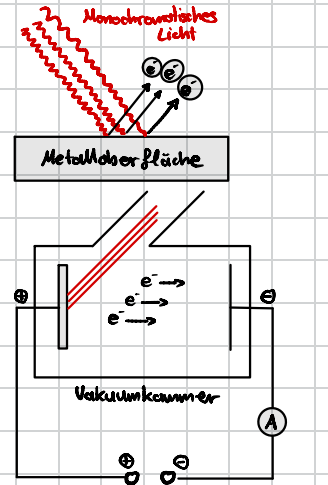
Photoelektrischer Effekt

Beim Photoeffekt wird eine Metalloberfläche mit monochromatischem Licht bestrahlt, wodurch die Elektronen teilweise herausgelöst werden können. Dafür müssen die Elektronen eine materialspezifische Austrittsarbeit E_{Aus} überwinden.

- Metalloberfläche ist eine Elektrode die mit monochromatischem Licht bestrahlt wird (e^- lösen sich aus)
- Ausgelöste Elektronen fliegen zur Kollektorelektrode und sind so als Strom messbar.
↳ Menge an Photoelektronen \propto Stromstärke
- Man möchte die kinetische Energie der Photoelektronen messen, indem man ein Gegenfeld anlegt, wodurch die Elektronen abgebremst werden.

↳ Wenn kein Photostrom mehr fließt entspricht die angelegte Spannung der kin. Energie der e^- .

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_e v^2 = e U_{\text{Brems}}$$



- Spannung U : E_{kin} der Photoelektronen
- Stromstärke I : Menge an Photoelektronen

Für monochromatische Wellen würde man jetzt erwarten, dass die kinetische Energie und die Menge an Photoelektronen linear von der Intensität und Frequenz abhängt, da nur von Relevanz sein sollte, wie viel Energie pro Zeit vom Licht übertragen wird.

Beobachtung:

- Der Photostrom I (Menge an Elektronen) ist proportional zur Intensität des Lichts, aber unabhängig von der Frequenz des Lichts. ①
- Die Bremsspannung U (E_{kin} der Photoelektronen) ist proportional zur Frequenz des Lichts, aber unabhängig von seiner Intensität des Lichts. ②
- Das Licht kann unabhängig von dessen Intensität erst ab einer bestimmten Frequenz Elektronen aus der Platte lösen. ③

Nach dem Wellenmodell des Lichts ist dies nicht erklärlich, da mit zunehmender Intensität auch mehr Elektronen herausgelöst würden. Dafür wurde eine Quantisierung des Lichts postuliert, wobei Lichtteilchen, die Photonen, die Energie $h\nu$ besitzen. Sofern diese Energie grösser ist, als die Bindungsenergie der Elektronen im Metall, so können Elektronen herausgelöst werden. Nach Energieerhaltung ergibt sich für die Energie des Photons die Austrittsarbeit E_A und der max. kin. Energie der Elektronen $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$.

$$E_{\text{ph}} = h\nu = E_A + E_{\text{kin}} \quad E_{\text{kin}}^{\text{max}} = \frac{1}{2} m_e v^2 = h\nu - E_A$$

- ① Die Menge an Elektronen ist nur abhängig von der Menge an Photonen, aber nicht von der Energie eines Photons.
- ② Die Energie der Elektronen ist nur abhängig von der Energie des Photons, aber nicht von der Menge an Photonen.
- ③ Die Energie der Photonen ist nicht kummulierbar.
- ④ Eine Natrium-Kathode hat die Austrittsarbeit $\bar{\Phi} = 228 \text{ eV}$.

a) Berechnen Sie die Grenzwellenlänge λ_{Grenz} , ab der Photoemission stattfindet.

b) Mit Licht der Wellenlänge $\lambda = 550 \text{ nm}$ bestrahlt: Berechnen Sie die maximale kinetische Energie der Photonen.

c) Bestimmen Sie die maximale Geschwindigkeit der Photoelektronen.

⑤ Bei einem Photoeffekt-Experiment werden bei zwei verschiedenen Wellenlängen die maximalen kinetischen Energien der Elektronen gemessen.

$$\lambda_1 = 500 \text{ nm} \quad E_{\text{kin,max},1} = 0.53 \text{ eV} \quad \lambda_2 = 350 \text{ nm} \quad E_{\text{kin,max},2} = 1.59 \text{ eV}$$

a) Stellen Sie das Gleichungssystem auf und bestimmen Sie die Austrittsarbeit Φ des Metalls.

b) Welches Alkalimetall könnte als Kathode verwendet worden sein? (typische Φ -Werte: Na 2.28 eV, K 2.30 eV, Rb 2.16 eV, Cs 1.95 eV)

⑥ Eine Cäsium-Photokathode ($\Phi = 1.95 \text{ eV}$) wird mit UV-Licht der Wellenlänge $\lambda = 280 \text{ nm}$ bestrahlt.

a) Berechnen Sie die maximale kinetische Energie der Photoelektronen.

b) Welche Gegenspannung U_{stop} muss angelegt werden, um die Photoelektronen gerade noch zum Stillstand zu bringen?

c) Wie ändert sich U_{stop} , wenn die Lichtintensität verdoppelt wird. Begründen Sie.

De-Broglie-Wellen

Die Beschreibbarkeit des Lichts sowohl durch Wellen, wie auch durch Teilchen, wird **Welle-Teilchen-Dualismus** genannt. Trotzdem, dass Photonen massen- und ladungslos sind, haben sie einen Impuls \vec{p} und einen Spin $s=1$.

$$E_{\text{ph}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu} \quad |\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = h\bar{\nu}$$

De-Broglie postulierte den Welle-Teilchen-Dualismus auch für Materie, sodass jedes Materieteilchen auch Wellencharakter zeigen würde. Die De-Broglie Wellenlänge ist dabei analog zum Licht definiert.

$$\lambda_B = \frac{h}{|p|} = \frac{h}{m|\vec{v}|} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_{kin}}}$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_e \vec{v}^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m_e}$$

$$\psi(z,t) = \psi_0 e^{i(kz - \omega t)}$$

Herleitung (kurz):

$$p = mv = mc \quad E = mc^2 = pc \quad E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = mv \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

⑦ Berechnen Sie die De-Broglie Wellenlänge für jedes der folgenden Teilchen:

a) Elektron, kinetische Energie 100 eV

b) Thermisches Neutron $E_{kin} = \frac{2}{3} k_B T$ bei $T = 300$ K

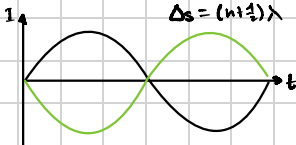
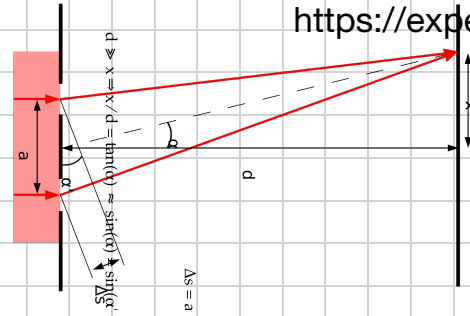
c) Tennisball: $m = 58$ g $v = 20 \frac{m}{s}$

Interferenz

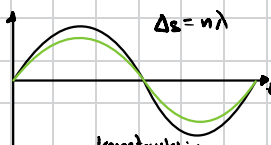
Interferenzeffekte sind die typischen Nachweisexperimente für den Wellencharakter eines Teilchens, wozu beispielsweise der Doppelspalt oder die Elektronenbeugung an Kristallen zählen. Der Doppelspalt funktioniert für alle Wellen, die Spaltgröße und Abstände muss entsprechend der Wellenlänge λ angepasst werden.

<https://experimente.phys.ethz.ch/de/100/10005/20007/30651/>

Wird monochromatisches Licht auf einen Doppelspalt mit den Spaltmässen a geworfen, so entsteht auf dem Schirm dahinter ein Interferenzmuster. Dies entsteht, da die beiden Spalten zwei Quellen für Wellen sind und diese konstruktiv und destruktiv interferieren können.



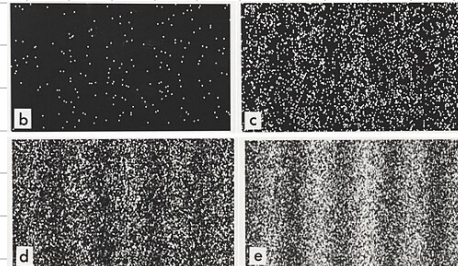
destruktiv



konstruktiv

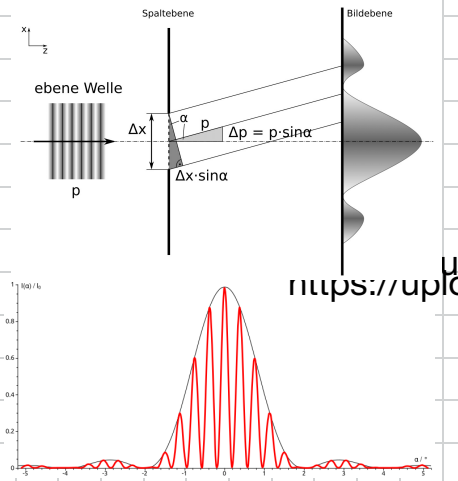
$$\sin(\alpha) = \frac{\Delta s}{a} \quad \tan(\alpha) = \frac{x}{d} \quad \text{kleine Winkel: } \sin \alpha \approx \tan \alpha$$

$$\frac{\Delta s}{a} = \frac{x}{d} \Rightarrow x = \frac{d \Delta s}{a} \Rightarrow x_{max} = \frac{d n \lambda}{a}$$



Die Annahme, dass die beiden Spalte perfekte Punktquellen sind ist eine sinnvolle Vereinfachung,

Jedoch haben Photonen auch bei den beiden Einzelspaltkanten einen Gangunterschied. Aus diesem Grund sind auch am Einzelspalt Interferenzeffekte beobachtbar. Für Licht ist der Doppelspalt vollständig klassisch erklärbar, jedoch wurde er auch für Teilchen wie Neutronen im Einzelbeschuss beobachtet. Wird das Experiment jedoch hinter dem Spalt beobachtet, verschwindet das Interferenzmuster. Das liegt daran, dass vor der Messung das Quantensystem eine Überlagerung von zwei Zuständen gewesen ist, jedoch nach der Messung nur noch ein Zustand verbleibt.



⑧ Elektronen werden durch eine Beschleunigungsspannung von $U=150\text{ V}$ beschleunigt und treffen auf einen Doppelspalt mit Spaltabstand $d=1.0\mu\text{m}$. Auf einem Detektorschirm im Abstand $L=1.0\text{ m}$ vom Doppelspalt entsteht ein Interferenzmuster.

a) Berechnen Sie die De-Broglie Wellenlänge der Elektronen.

b) Berechnen Sie den Abstand Δy benachbarter Maxima auf dem Schirm.

c) Was passiert, wenn die Intensität so weit reduziert, dass jeweils nur ein einzelnes Elektron im Apparat ist?

⑨ Im Davisson-Germer-Experiment (1927) werden Elektronen mit der kinetischen Energie $E_{\text{kin}}=50\text{ eV}$ an einem Nickelkristall gestreut. Der Netzebenenabstand beträgt $d=0.215\text{ nm}$.

a) Berechnen Sie die De-Broglie Wellenlänge der Elektronen

b) Unter welchem Beugungswinkel θ wird das Maximum erster Ordnung gemäss Bragg-Bedingung $2d\sin\theta = m\lambda$ ($m=1$) erwartet?

Heisenberg'sche Unschärferelation

In der QM können wir Messgrößen (Observablen) häufig nur mit endlicher Genauigkeit angeben. Beispielsweise sagt die Heisenberg'sche Unschärferelation, dass Ort und Impuls eines Teilchens nicht mit unendlicher Genauigkeit bestimmt werden kann.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Δx : Ortunschärfe

Δp : Impulsunschärfe

ΔE : Energieunschärfe

Δt : Zeitunschärfe

⑩ Ein Elektron im Wasserstoffatom ist auf dem Bohr-Radius $a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$ lokalisiert.

a) Berechnen Sie die minimale Impulsunschärfe Δp

b) Schätzen Sie die minimale kinetische Energie des Elektrons.

c) Vergleichen Sie mit der Bindungsenergie des Wasserstoffatoms im Grundzustand (13.6 eV).

⑪ Ein angeregter atomarer Zustand zerfällt mit einer Lebensdauer von $\tau = 10 \text{ ns}$ unter Emission eines Photons.

a) Berechnen Sie die minimale Energieunschärfe des Zustands in eV.

b) Wie gross ist die entsprechende Frequenzunschärfe $\Delta \nu$ und Wellenzahlunschärfe $\Delta \tilde{\nu}$?

⑫ Ein Elektron ist in einem Quantenpunkt in einem Bereich der Grösse $L = 1.0 \text{ nm}$ eingesperrt. Schätzen Sie die minimale kinetische Energie des Elektrons in eV ab.

Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung ist eine Gleichung der verallgemeinerten Mechanik und kann quantenmechanische Systeme beschreiben. Die zeitabhängige SG postuliert noch die Zeitpropagation eines Systems. Die zeitunabhängige SG betrachtet ein System zu genau einem Zeitpunkt.

zeitabhängige SG: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$

zeitunabhängige SG: $\hat{H} \psi = E \psi$

i : imaginäre Einheit ($i = \sqrt{-1}$)

\hbar : reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum

$\frac{\partial}{\partial t}$: partielle Ableitung nach der Zeit

\hat{H} : Hamilton-Operator

ψ : Wellenfunktion

Operatorenalgebra

Operatoren sind mathematische Anweisungen, die wir auf Funktionen anwenden.

Beispielsweise: "Multipliziere mit 5", "Addiere mit 2", "Leite einmal ab" etc.

Wenn Operatoren Funktionen nur skalieren ist ψ eine Eigenfunktion des Operators und der reelle Skalierungsfaktor $\lambda \in \mathbb{R}$ ist der Eigenwert

Eigenwertgleichung: $\hat{O} f(x) = \lambda f(x)$

↑ Operator ↑ Eigenfunktion ↘ Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$

Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$\hat{O} = \frac{d}{dx}$ $f(x) = x^2$ $\hat{O}f = \frac{d}{dx}[x^2] = 2x$ kein Eigenfunktion
 $g(x) = e^{2x}$ $\hat{O}g = \frac{d}{dx}[e^{2x}] = 2e^x$ Einfunktion mit $\lambda = 2 \in \mathbb{R}$

Wichtige QM-Operatoren: $\hat{x} = x$ $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

⑬ Gegeben sei die Wellenfunktion $\psi(x) = A e^{ikx}$ $k \in \mathbb{R}$

a) Ist ψ Eigenfunktion des Impulsoperators \hat{p} ?

b) Ist ψ Eigenfunktion des Ortsoperators \hat{x} ?

c) Ist ψ Eigenfunktion des Operators $\hat{H} = \hat{p}^2 / (2m)$?

⑭ Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}]$ durch explizite Anwendung auf eine Testfunktion $f(x)$.

Hamiltonoperator

Die Schrödingergleichung ist eine Verallgemeinerung der klassischen Mechanik nach dem Hamilton-Formalismus (Vorl.: Allgemeine Mechanik, 3. Sem. Physik). Der Hamiltonoperator \hat{H} enthält alle Informationen eines QM-Systems (Postulat 1). Wendet man \hat{H} auf die zugehörige Wellenfunktion ψ eines Systems an, dann kommt die Energie des Systems multipliziert mit ψ heraus (Eigenwertgleichung: $\hat{H}\psi = E\psi$).

$\Rightarrow \hat{H} \equiv$ "Energieoperator"

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{kin}} + \hat{V}_{\text{pot}} = \hat{T} + \hat{V}$$

In PC 0 haben wir nur 2 Energiebeiträge. Die potenzielle Energie des Systems wird durch die Aufgabe / Problem / QM-System gegeben. Der kinetische Energieoperator \hat{T}_{kin} ist immer gleich für Systeme mit einem Teilchen.

$$1D: \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$2D: \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

$$3D: \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\text{Laplace-Operator } \Delta = \nabla^2 = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad N = \dim(\text{System})$$

Einfach die Summe aller zweifachen Ortsableitungen

$$\Delta_{1D} = \frac{d^2}{dx^2} \quad \Delta_{2D} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \Delta_{3D} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

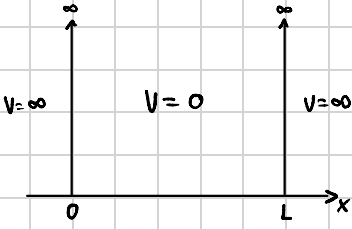
Jeder Hamiltonian \hat{H} hat eine zugehörige Eigenfunktion, die Wellenfunktion ψ , die aber meistens komplexwertig ist, nicht messbar ist und deswegen keine direkte physikalische Bedeutung hat. In PC II merkt man dann auch, dass man sie eigentlich nie explizit berechnen muss, da man nur an den Energieeigenwerten interessiert ist (bspw. Spin). Da wir ein Teilchen in der QM nicht mehr über den Ort charakterisieren können, haben wir jetzt die Wellenfunktion, die ein bisschen die "Verzerrung" eines Teilchens anzeigt.

Born: Das Betragsquadrat $\psi^* \psi = |\psi|^2$ der Wellenfunktion ist die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Teilchens. Deswegen muss das Integral über den gesamten Raum gleich 1 sein, weil irgendwo muss das Teilchen im Raum sein.

$$\text{Normierungsbedingung: } \int_{\Omega} \psi^* \psi \, d\tau \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \begin{cases} 1D: \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx \stackrel{!}{=} 1 \\ 2D: \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx \, dy \stackrel{!}{=} 1 \\ 3D: \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx \, dy \, dz \stackrel{!}{=} 1 \end{cases}$$

Teilchen im Kasten

Das Teilchen im Kasten ist ein recht einfaches quantenmechanisches Modell bei dem sich ein Teilchen der Masse m in einem Potenzialtopf mit unendlichen hohen Wänden befindet. Nach der klassischen Physik würde man unendlich viel Energie benötigen, dass sich das Teilchen ausserhalb des Kastens befindet.



Der Hamiltonian \hat{H} setzt sich aus dem 1D Kinetikoperator \hat{T}_{kin} und dem Potenzialoperator \hat{V}_{pot} zusammen.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad \hat{H} = \hat{T}_{kin, 1D} + \hat{V}_{pot} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Das ergibt für die zeitunabhängige Schrödingergleichung im Kasten:

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right)\psi = E\psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + E\psi(x) = 0$$

Es liegt eine homogene, lineare Differenzialgleichung 2. Ordnung mit konst. Koeff. vor, welche wir mit dem Euleransatz lösen können:

- ① Charakteristisches Polynom: $\chi(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 + E \stackrel{!}{=} 0$
- ② $-E = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \Leftrightarrow -\frac{2mE}{\hbar^2} = \lambda^2 \Rightarrow \lambda = \pm i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ (kompl. konj. Ns.)
- ③ $\psi(x) = A e^{i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + B e^{i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$
 $= A \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$

Vorgehen: Homogene Lösung nach Euler-Ansatz

1. Charakteristisches Polynom ($y^{(n)}(x) \Rightarrow \lambda^n$).
2. Nullstellen des Polynoms mit ggf. Polynomdiv.
3. Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \dots \Rightarrow$ Fundamentallösungen:
 - a) Unterschiedliche reelle Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$:
 $y(x) = A e^{\lambda_1 x} + B e^{\lambda_2 x} + C e^{\lambda_3 x}$
 - b) Mehrfache Nullstellen $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda$:
 $y(x) = x^0 A e^{\lambda x} + x^1 B e^{\lambda x} + x^2 C e^{\lambda x}$

Die Summanden werden sukzessive mit höheren Potenzen von x multipliziert.

c) Komplexe Nullstellen (in kompl. konj. Paaren) $\lambda = a \pm ib$:
 $y(x) = A e^{ax} \cos(bx) + B e^{ax} \sin(bx)$

4. $y(x) =$ Summe der Fundamentallösungen

Eine Bedingung für eine sinnvolle Wellenfunktion $\psi(x)$ ist, dass sie stetig ist und da für $x > L$ und $x < 0$ für die Wellenfunktion $\psi = 0$ gelten muss haben wir folgende Randbedingung: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$$\psi(0) = A \cos(0) + B \sin(0) = A \stackrel{!}{=} 0 \quad \boxed{A=0} \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\psi(L) = B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L\right) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi \Leftrightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} L^2 = n^2 \pi^2$$

Der Sinus wird null, wenn in seinem Argument $n\pi$ ist!

$$\frac{2mE}{\hbar^2} L^2 = n^2 \pi^2 \Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m L^2} = \frac{\hbar^2 n^2}{8m L^2} \quad \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8m L^2}} \quad \text{Energieeigenwerte}$$

Damit ergibt sich die Quantisierung durch die Erfüllung der Randbedingungen. Den Wert von E lässt sich nun in die Wellenfunktion einsetzen.

$$\psi_n(x) = B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) = B \sin\left(\frac{\sqrt{2m} \cdot \frac{\hbar n \pi}{2m L}}{\hbar} x\right) = B \sin\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{n \pi \hbar}{2m L} x\right) = B \sin\left(\frac{n \pi x}{L}\right)$$

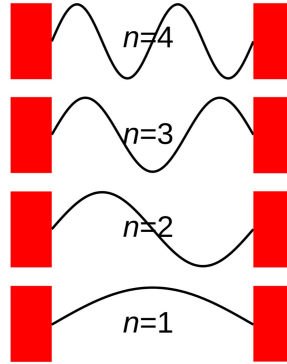
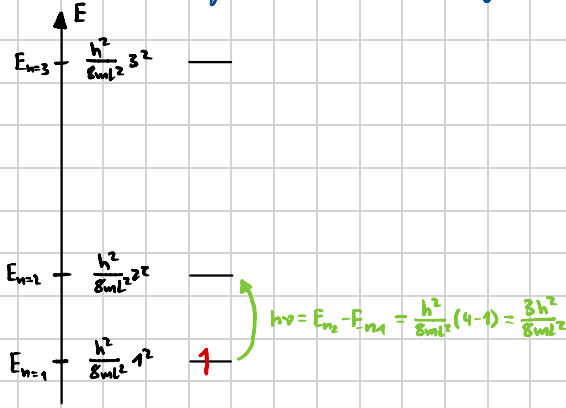
Um die Konstante $B \in \mathbb{R}$ herauszufinden nutzen wir die Normierungsbedingung, denn die Wellenfunktion im Betragsquadrat ist nach der Interpretation nach Born eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Folgedessen muss sie integriert über den ganzen Raum 1 ergeben.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \stackrel{!}{=} 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L B^2 \sin^2\left(\frac{n \pi x}{L}\right) dx = B^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n \pi x}{L}\right)}{2} dx$$

$$\Rightarrow \frac{B^2}{2} \left[x - \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \frac{L}{2n\pi} \right]_0^L = \frac{B^2}{2} \left(L - \sin\left(\frac{2n\pi L}{L}\right) \frac{L}{2n\pi} - \left(0 - \sin\left(0\right) \frac{L}{2n\pi}\right) \right) = \frac{B^2}{2} \left(L - \sin(2n\pi) \frac{L}{2n\pi} \right) = \frac{B^2 L}{2}$$

$$\Rightarrow 1 \stackrel{!}{=} \frac{B^2 L}{2} \Leftrightarrow B^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

Damit haben wir die Energieeigenwerte und die Wellenfunktion für das Teilchen im Kasten hergeleitet. Würde sich ein Elektron im Kasten befinden, so könnte es nur Energien von E_n (Energieniveaus) annehmen



Vorgehen bei QM-Problemen:

1. \hat{H} bestimmen (vor allem V)
2. Schrödingergleichung aufstellen
3. Mit entsprechendem Ansatz lösen
4. Randbedingungen einsetzen (Quantisierung)
5. Normieren mit $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$
6. ψ in die Schrödingergleichung einsetzen und E bestimmen

1. Die Quantisierung eines Systems kommt durch das Erfüllen der Randbedingungen zustande. Eine Quantenzahl beschreibt einen Zustand des Systems.
2. Die Anzahl der verschiedenen Quantenzahlen entspricht der Dimension des Problems
3. Nullstellen der Wellenfunktion sind **Knoten**, wobei die Energie des Systemzustands mit steigender Knotenzahl zunimmt.
4. QM-Systeme haben oft eine **Nullpunktsenergie** ungleich null. Beim Teilchen im Kasten entspricht das

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$

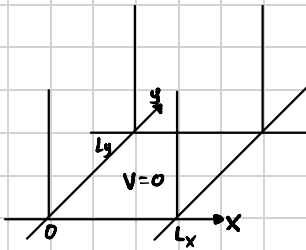
⊕ Es befinden sich 5 Elektronen in einem Kasten und sie interagieren nicht miteinander. Welche Wellenlänge hat dasjenige Licht, welches ein Elektron von HOMO ins LUMO anzuregen.

16) Wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im linken Viertel des Kastens befindet?

17) Wo befinden sich für $n=4$ die Knoten der Wellenfunktion?

18) Überprüfe, ob ψ eine Eigenfunktion des Impulsoperator \hat{p}_x bzw. \hat{p}^2 ist.

Jetzt wollen wir das Modell des Teilchens im Kasten auf höhere Dimensionen ausweiten, sodass wir mit dem **2D-Kasten** beginnen



$$\hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad \hat{V}_{\text{pot}} = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = E\psi$$

Das Problem ist, dass die SG hier eine partielle DGL ist, dessen Lösung nicht trivial ist (mehr im 3. Sem. in PDE).

Wenn in der Quantenmechanik die Dimensionalität von nicht gekoppelten Systemen erhöht wird ist der **Produktansatz** sehr gut. Man geht davon aus, dass eine Lösung des Problems gerade das Produkt der eindimensionalen Probleme ist.

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad \psi = \psi_x \cdot \psi_y \cdot \psi_z \quad E = E_x + E_y + E_z$$

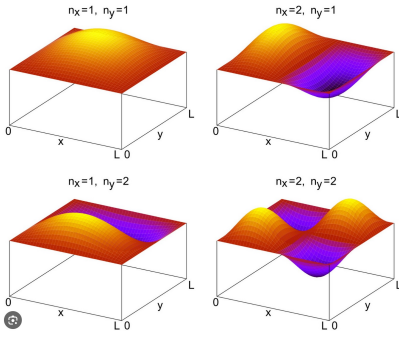
$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) X(x)Y(y) = EX(x)Y(y)$$

Aus dem Produktansatz können wir die Lösung des 2D-Kastens herleiten:

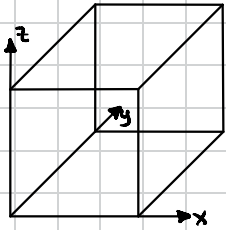
$$\psi(x,y) = X(x) \cdot Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 n_x^2}{8mL_x^2} + \frac{\hbar^2 n_y^2}{8mL_y^2} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

Falls in der Klausur nach einem Ansatz zur Ermittlung der Energieeigenwerte auf Grundlage der gegebenen Wellenfunktion gefragt ist, muss der Hamiltonoperator auf die Wellenfunktion angewendet werden.

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_{n_x, n_y}(x, y) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \\
 &= -\frac{2\hbar^2}{2m\sqrt{L_x L_y}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \right) \\
 &= -\frac{2\hbar^2}{2m\sqrt{L_x L_y}} \left(-\frac{n_x^2 \pi^2}{L_x^2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) - \frac{n_y^2 \pi^2}{L_y^2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \right) \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2 \pi^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2 \pi^2}{L_y^2} \right) \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \\
 &= \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) = E_{n_x, n_y} \psi_{n_x, n_y}(x, y)
 \end{aligned}$$



Selbiges gilt dann auch für den 3D-Kasten:



$$\hat{T}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{3D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad \hat{V}_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$$\varphi = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

19) Gegeben sei die Wellenfunktion $\varphi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

a) Testen Sie durch explizite Berechnung, ob φ eine Eigenfunktion des Impulsoperators \hat{p} ist. Geben sie ggf. den Eigenwert an.

b) Testen Sie, ob φ eine Eigenfunktion des Operators für kinetische Energie $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ ist.

c) Zeigen Sie, dass φ die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt, sofern $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

20) Ein Elektron in einem quadratischen 2D-Kasten ($L_x = L_y = L = 1.0 \text{ nm}$) sei betrachtet.
 a) Berechnen Sie den Wert von $\frac{\hbar^2}{8mL^2}$ in eV und geben Sie die drei niedrigsten Energieniveaus an.

b) Welche Niveaus sind entartet? Erklären Sie über Symmetrie

c) Welche Wellenlänge hat ein Photon das beim Übergang von Grundzustand zum ersten angeregten Zustand absorbiert?