2. Tutorium VU Quantentheorie I – Lösungen, 23.10.2015

1.
   - $\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)$,
     $0 \leq x \leq L_x,\ 0 \leq y \leq L_y,\ 0 \leq z \leq L_z,\ n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}^+$
   - $E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$
     Abhängig von den konkreten Werten für (L_x, L_y, L_z) kann es zur Entartung kommen, d.h. unterschiedliche Kombinationen von Quantenzahlen (n_x, n_y, n_z) führen zur selben Gesamtenergie. Wenn dieser Fall eintritt, lässt sich ein Eigenzustand nicht mehr eindeutig über seine Energie identifizieren.

2. a) $\psi(x_0-) = \psi(x_0+) = \psi(x_0),\ \psi'(x_0-) = \psi'(x_0+) = \psi'(x_0)$
   Im Grenzfall $V_0 \to \infty$ wird die Schrödingergleichung nur mehr im Bereich $x < x_0$ gelöst. Am Rand des Definitionsbereichs muss $\psi(x_0) \to 0$ gelten.

   b) $\psi(x_0-) = \psi(x_0+) = \psi(x_0),\ \psi'(x_0-) = \psi'(x_0+) - V_0 \frac{2m}{\hbar^2} \psi(x_0)$

3.
   - Es existiert nur ein gebundener Zustand zur Energie $E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m}$.
   - $\psi(x) = \sqrt{D} e^{-D|x|}$

4. a) Es existiert ein gebundener Zustand für den Fall $E < 0$ falls die transzendente Gleichung $k = D(1 - e^{-2kl})$ eine nichttriviale Lösung $k > 0$ hat $(k = \sqrt{\frac{\hbar^2 |E|}{2m}})$. Vergleicht man die Steigung der linken und rechten Seite der analytisch nicht lösbaren Gleichung im Punkt $k = 0$ erkennt man, dass diese Lösung genau dann existiert wenn $l > \frac{1}{2D}$ gilt.

   b) Wegen $k < D$ wird die Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ des gebundenen Zustands durch die Wand größer (d.h. weniger negativ), der Zustand ist also schwächer gebunden. Für große l findet man näherungsweise $E \approx -\frac{\hbar^2 D^2}{2m} \left(1 - e^{-2Dl}\right)^2$ (1. Schritt einer Fixpunktiteration $k_{n+1} = D(1 - e^{-2k_n l})$ zum Startwert $k_0 = D$). Im Grenzfall $l \to \infty$ erhält man das Resultat aus Beispiel 3, $E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m}$.

   c) Für die Energie des Bindungszustands gilt: $E(l) = -\frac{\hbar^2 k(l)^2}{2m}$
   Die Wellenfunktion lautet:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A\left(e^{kx} - e^{-2kl} \cdot e^{-kx}\right) & x \leq 0 \\ A\left(1 - e^{-2kl}\right) e^{-kx} & x > 0 \end{cases}$$

   $A = \sqrt{\frac{k}{1 - e^{-2kl}(1 + 2kl)}}$, bzw. nach Einsetzen der Bedingung für k:
   $A = \sqrt{\frac{D}{1 + kl - kl \coth(kl)}}$

Um für $D = 1$ eine numerische Lösung für die Energie (bzw. $\frac{Em}{\hbar^2}$) und die Wellenfunktion $\psi(x)$ als Funktion von l zu finden, ist es also lediglich erforderlich die Gleichung $k = (1 - e^{-2kl})$ für verschiedene l zu lösen und das gefundene $k(l)$ dann in den Ausdruck für E und $\psi(x)$ einzusetzen. Dazu gibt es viele Möglichkeiten: (i) Die Funktionen k und $1 - e^{-2kl}$ plotten (z.B. mit gnuplot) und den Schnittpunkt ablesen, (ii) systematisches "Ausprobieren" für welche Werte die Gleichung näherungsweise erfüllt wird (Bisektion), (iii) Fixpunktiteration, (iv) Newton-Verfahren, ..., usw. Alternativ lässt sich die Lösung natürlich auch mit einem Softwarepaket wie Mathematica, Maple oder Matlab schnell finden.

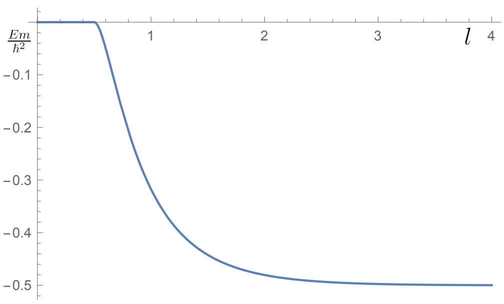

Abbildung 1: $E(l) \cdot \frac{m}{\hbar^2}$

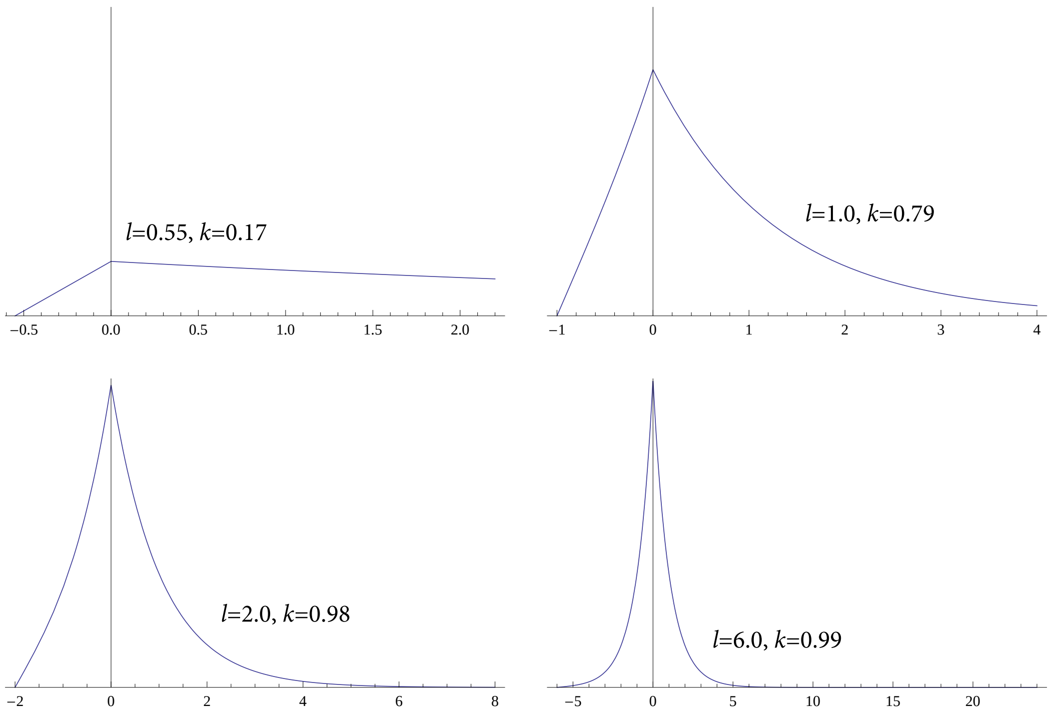

Abbildung 2: $\psi(x)$ für $D = 1$ und verschiedene Werte für l und $k(l)$