Name: Luca Cordes, 444900

RWTH AACHEN UNIVERSITY

Experimentalphysik III (WS 2023/2024)

Übung 12

Tutorium: 8 Abgabe: 16.01.2024

Aufgabe 1: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im H-Atoms
Die Wellenfunktion des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms lautet

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons ist egegen durch

$$P(r) = 4\pi r^2 \left|\psi(r)\right|^2$$

Wie groß ist der wahrscheinlichste Abstand des Elektrons zum Kern?

. . . .

$$\begin{aligned}
0 &\overset{!}{=} \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}r} \\
&= \frac{\partial}{\partial r}\left(4\pi r^2 \left|\psi(r)\right|^2\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial r}\left(4\pi r^2 \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{4r^2}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}}\right) \\
&= \left(\frac{8r}{a^3} - \frac{8r^2}{a^4}\right) e^{-\frac{2r}{a}} \\
\implies 0 &= -ar + r^2 \\
\implies r &= a \ , \quad \text{für } a > 0
\end{aligned}$$

Aufgabe 2: Endlicher Potentialtopf
Ein endlicher Potentialtopf sei gegeben über

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ , & \text{für } x \in [-a, a] \\ V_0 \ , & \text{sonst} \end{cases} \quad , \quad \text{mit } V_0 > 0$$

Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der stationären Schrödingergleichung für ein Teilchen mit der Energie E mit $0 < E < V_0$ im Potential $V(x)$. Benutzen Sie als Lösungsansatz

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= \alpha_1 e^{\kappa x} + \alpha_2 e^{-\kappa x} \ , \quad \text{für } x < -a \\
\psi_2(x) &= \beta_1 e^{ikx} + \beta_2 e^{-ikx} \ , \quad \text{für } -a \leq x \leq a \\
\psi_3(x) &= \gamma_1 e^{\kappa x} + \gamma_2 e^{-\kappa x} \ , \quad \text{für } a < x
\end{aligned}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \qquad \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Benutzen Sie zunächst die Bedingung, dass die Wellenfunktion für ein physikalisches Problem endlich bleiben muss. Wenden Sie anschließend die aus der Vorleseung bekannten Stetigkeitsbedingungen an.

. . . .

Die Symmetrie des Problems impliziert, dass $P(x) = P(-x) \implies |\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$ und somit $\psi(x) = \pm\psi(-x)$. Außerdem müssen für Konvergenz bei $x \to \pm\infty$ die Konstanten $\alpha_2 = \gamma_1 = 0$ gewählt werden.

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= \alpha_1 e^{\kappa x} \\
\psi_2(x) &= \beta_1 e^{ikx} + \beta_2 e^{-ikx} \\
\psi_3(x) &= \gamma_2 e^{-\kappa x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_1(-a) &= \psi_2(-a) \\
\alpha_1 e^{-\kappa a} &= \beta_1 e^{-ika} + \beta_2 e^{ika}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_3(a) &= \psi_2(a) \\
\gamma_2 e^{-\kappa a} &= \beta_1 e^{ika} + \beta_2 e^{-ika}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right|_{x=-a} &= \left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=-a} \\
\kappa\alpha_1 e^{-\kappa a} &= ik\beta_1 e^{-ika} - ik\beta_2 e^{ika}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial\psi_3}{\partial x}\right|_{x=a} &= \left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=a} \\
-\kappa\gamma_2 e^{-\kappa a} &= ik\beta_1 e^{ika} - ik\beta_2 e^{-ika}
\end{aligned}$$

Für $\psi(x) = \psi(-x)$:

$$\implies \beta := \beta_1 = \beta_2 \qquad \text{und} \quad \alpha := \alpha_1 = \gamma_2$$

$$\begin{aligned}
\alpha e^{-\kappa a} &= \beta e^{ika} + \beta e^{-ika} \\
-\kappa\alpha e^{-\kappa a} &= ik\beta e^{ika} - ik\beta e^{-ika}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha e^{-\kappa a} &= 2\beta\cos ka \\
\kappa\alpha e^{-\kappa a} &= 2k\beta\sin ka
\end{aligned}$$

$$\kappa = k\tan ka \implies \text{diskrete Energieniveaus}$$

Für $\psi(x) = -\psi(-x)$:

$$\implies \beta := \beta_1 = -\beta_2 \qquad \text{und} \quad \alpha := \alpha_1 = -\gamma_2$$

$$\begin{aligned}
-\alpha e^{-\kappa a} &= \beta e^{ika} - \beta e^{-ika} \\
\kappa\alpha e^{-\kappa a} &= ik\beta e^{ika} + ik\beta e^{-ika}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\alpha e^{-\kappa a} &= 2i\beta \sin ka \\
-\kappa\alpha e^{-\kappa a} &= 2ik\beta \cos ka
\end{aligned}
$$

$$
\kappa = -\frac{k}{\tan ka} \implies \text{diskrete Energieniveaus}
$$

Die zu jedem Energiezustand zugehörige Wellenfunktion soll normalisiert sein.
Für $\psi(x) = \psi(-x)$:

$$
\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{-a} \mathrm{d}x\, \psi_1\bar{\psi}_1 + \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\, \psi_2\bar{\psi}_2 + \int_{a}^{\infty} \mathrm{d}x\, \psi_3\bar{\psi}_3 \\
&= \int_{-\infty}^{-a} \mathrm{d}x\, \alpha\bar{\alpha}\, e^{2\kappa x} + \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\, 2\beta\bar{\beta}\cos^2 kx + \int_{a}^{\infty} \mathrm{d}x\, \alpha\bar{\alpha}\, e^{-2\kappa x} \\
&= 2\alpha\bar{\alpha} \int_{a}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-2\kappa x} + 2\beta\bar{\beta} \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\, \frac{1+\cos 2kx}{2} \\
&= \frac{|\alpha|}{\kappa} e^{-2\kappa a} + |\beta| \left(2a + \frac{\sin 2ka}{k}\right) \\
&= \frac{2\cos ka\, e^{\kappa a}\, |\beta|}{\kappa} e^{-2\kappa a} + |\beta| \left(2a + \frac{\sin 2ka}{k}\right) \\
|\beta| &= \left(\frac{2\cos ka}{\kappa} e^{-\kappa a} + 2a + \frac{\sin 2ka}{k}\right)^{-1} \\
\alpha &= 2\beta \cos ka\, e^{\kappa a}
\end{aligned}
$$

Für den asymmetrischen Fall $\psi(x) = -\psi(-x)$ wechseln sich cos und sin:

$$
\begin{aligned}
|\beta| &= \left(\frac{2\sin ka}{\kappa} e^{-\kappa a} + 2a + \frac{\cos 2ka}{k}\right)^{-1} \\
\alpha &= 2i\beta \sin ka\, e^{\kappa a}
\end{aligned}
$$

Hat man ein Teilchen, dessen Energie entweder $\kappa = k \tan ka$ oder $\kappa = -\frac{k}{\tan ka}$ erfüllt, ist somit die zugehörige Wellengleichung bis auf einen komplexen Vorfaktor bestimmt, der jedoch keinen Einfluss auf beobachtbare Größen hat. β kann daher der Einfachheit halber immer als $\beta \in \mathbb{R}$ gewählt werden.

Aufgabe 3:

In den Bereichen $I_1 = (-\infty, -a)$, $I_2 = (-a, -a)$ und $I_3 = (a, \infty)$ ist das Potenzial konstant, das Teilchen bewegt sich daher auf jedem jeweils wie eine freies Teilchen:

$$
\begin{aligned}
E\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V\psi(x) \\
0 &= \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi \\
\implies \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}\ ,\ k = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}
\end{aligned}
$$

Damit sind die Wellenfunktionen für die drei Abschnitte jeweils der Form

$$
\psi_1 = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \qquad \psi_2 = B_1 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x} \qquad \psi_3 = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}
$$

mit

$$k = \sqrt{2mE_0/\hbar^2} \qquad \text{und} \quad k' = \sqrt{2m(E_0 - V_0)/\hbar^2}$$

Der Term mit C_2 in ψ_3 repräsentiert ein Teilchen, dass von $x = \infty$ nach links reist; Dies ist per Konstruktion nicht möglich, der Vorfaktor C_2 muss daher gleich null sein.

Die Wellenfunktion und ihre Ableitungen, müssen an den Sprungstellen des Potenzials stetig sein:

$$\text{I.: } \psi_1(-a) = \psi_2(-a) \qquad \text{II.: } \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\text{III.: } \left.\frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right|_{-a} = \left.\frac{\partial \psi_2}{\partial x}\right|_{-a} \qquad \text{IV.: } \left.\frac{\partial \psi_2}{\partial x}\right|_{a} = \left.\frac{\partial \psi_3}{\partial x}\right|_{a}$$

$$\begin{aligned}
\text{I.} \implies \quad & A_1 e^{-ika} + A_2 e^{ika} = B_1 e^{-ik'a} + B_2 e^{ik'a} \\
\text{II.} \implies \quad & B_1 e^{ik'a} + B_2 e^{-ik'a} = C_1 e^{ika} \\
\text{III.} \implies \quad & ikA_1 e^{-ika} - ikA_2 e^{ika} = ik'B_1 e^{-ik'a} - ik'B_2 e^{ik'a} \\
\text{IV.} \implies \quad & ik'B_1 e^{ik'a} - ik'B_2 e^{-ik'a} = ikC_1 e^{ika}
\end{aligned}$$

Sei

$$\begin{aligned}
R &= \frac{A_2 \bar{A}_2}{A_1 \bar{A}_1} := r\bar{r} \text{ , reflektierter Anteil} \\
T &= \frac{C_2 \bar{C}_2}{A_1 \bar{A}_1} := t\bar{t} \text{ , transmittierter Anteil} \\
1 &= R + T
\end{aligned}$$

Damit gibt es insgesamt sieben Unbekannte und sieben Gleichung - das Gleichungssystem ist theoretisch lösbar, aber ich investier meine Zeit heute lieber noch in was anderes :)