Quantenobjekte werden durch die Schrödingergleichung beschrieben! Lösungen dieser Differentialgleichungen werden meist mit $\Psi(t,x,y,z)$ bezeichnet. Dabei ist Ψ eine Wellenfunktion, deren Betragsquadrat $|\Psi|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Quantenobjekts beschreibt. Wenn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Quantenobjekts an einem Ort **nicht** von der Zeit abhängt, lässt sich die Situation durch die **stationäre** Schrödingergleichung $\Delta\Psi + 2m\hbar^{-2}(E-V)\Psi = 0$ beschreiben wobei $\hbar = h/(2\pi)$. Wenn sich das Quantenobjekt zusätzlich nur in einer Dimension bewegt, erfüllt seine Wellenfunktion die **eindimensionale, stationäre** Schrödingergleichung:

$$\Psi''(x) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V(x))\Psi(x) = 0 \tag{1}$$

Das Teilchen hat dabei die Masse m und bewegt sich im Potential $V(x)$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit P im Intervall $[a;b]$ ist durch das Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$P = \int_a^b |\Psi(x)|^2\,dx \tag{2}$$

gegeben. (Die Wahrscheinlichkeitsdichte muss “normierbar” sein).

1. **Aufgabe:**
   Wir betrachten ein Teilchen im Potentialtopf

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

   (a) Seien A, B konstant. Bestimme die Konstante k so, dass $\Psi_s = A\sin(kx)$ für $0 < x < L$ die Schrödingergleichung (1) erfüllt. Beweise, dass für dieses k dann auch $\Psi_c = B\cos(kx)$ und die Summe $\Psi = \Psi_s + \Psi_c$ Lösungen sind.

   (b) Da sich **außerhalb** des Bereiches $0 < x < L$ eine unendlich hohe Potentialbarriere befindet, muss dort offenbar $\Psi = 0$ sein. Die Wellenfunktion Ψ soll überall stetig sein. Was folgt aus den Randbedingungen bei $x = 0$ und $x = L$ für die Konstante B und für die Energie E?

   (c) Da sich das Teilchen irgendwo aufhalten muss, ist die durch (2) gegebene Aufenthaltswahrscheinlichkeit P für den gesamten Aufenthaltsbereich des Teilchens offensichtlich Eins. Bestimme mit dieser Normierungsbedingung die Konstante A. Die folgende Stammfunktion darf ohne Beweis benutzt werden:

   $$\int \sin^2(kx)\,dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4k}\sin(2kx) \tag{3}$$

   (d) Gib die Funktion Ψ in Abhängigkeit der Potentialtopflänge L und der Quantenzahl n an.

2. **Aufgabe:**
   Wir betrachten ein Modell mit einem Teilchen, welches sich **nur** im Intervall $I = [0,2]$ aufhalten kann. Es soll dort durch $\Psi(x) = \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)$ beschrieben werden.

   (a) Skizziere die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$.

   (b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das Teilchen in der “linken Hälfte” des Intervalls ?

   (c) Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das Teilchen im Bereich $[0;0,2]$ bzw. in $[0,9;1,1]$?

   (d) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Teilchen irgendwo im Intervall befindet.

3. **Aufgabe:**
   Für radialsymmetrische Funktionen $f(r) = f\left(\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right)$ gilt $\Delta f(r) = f''(r) + \frac{2}{r}f'(r)$. Bei einem sehr vereinfachten Modell[1] mit Coulombpotential ergibt sich damit für den radialen Anteil $f(r)$ der Wellenfunktion Ψ die Differentialgleichung:

   $$f''(r) + \frac{2}{r}f'(r) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)f(r) = 0 \tag{4}$$

   Seien A und a konstant. Beweise, dass $f(r) = Ae^{-\frac{r}{a}}$ bei geeigneter Energie E eine Lösung von (4) ist. Was ergibt sich für a und für die Energie E? Vergleiche E mit den Energien im Bohr'schen Atommodell.

[1] Es handelt sich hier noch nicht um ein vollständiges Atommodell. Das quantenmechanische Modell für das Wasserstoffatom ist deutlich komplizierter. Selbst die entsprechende Differentialgleichung für den radialen Lösungsanteil enthält in der Klammer noch einen zusätzlichen Term $-\hbar l(l+1)r^{-2}$ mit der Bahndrehimpulsquantenzahl l. Im Grundzustand $n = 1$ ist allerdings $l = 0$, wodurch dieser Term entfällt.

Im Folgenden sei $\vec{r} := (x, y, z)^\top$, $r := |\vec{r}| = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ und $\vec{\nabla} := \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)^\top$.

Satz 1:
Es gilt

$$\vec{\nabla} r = \frac{\vec{r}}{r} \tag{5}$$

Beweis: Es gilt:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{x}{r} \tag{6}$$

Analog folgt $\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}$ und $\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}$ und damit

$$\vec{\nabla} r = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial y} \\ \frac{\partial r}{\partial z} \end{pmatrix} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{\vec{r}}{r}. \qquad \square$$

Satz 2:
Sei f eine differenzierbare Funktion, die nur vom Abstand r abhängt. D.h. $f = f(r) = f\left(\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right)$. Es gilt dann:

$$\vec{\nabla} f(r) = \frac{df}{dr} \cdot \frac{\vec{r}}{r} = f'(r)\frac{\vec{r}}{r} \tag{7}$$

Beweis: Wegen der Kettenregel und (6) folgt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{df}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{df}{dr} \cdot \frac{x}{r} = f'(r) \cdot \frac{x}{r} \tag{8}$$

und damit

$$\vec{\nabla} f(r) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f'(r) \cdot \frac{x}{r} \\ f'(r) \cdot \frac{y}{r} \\ f'(r) \cdot \frac{z}{r} \end{pmatrix} = f'(r)\frac{\vec{r}}{r}. \qquad \square$$

Satz 3:
Sei f eine zweimal differenzierbare Funktion, die nur vom Abstand r abhängt. Dann gilt:

$$\Delta f(r) = \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{df}{dr} = f''(r) + \frac{2}{r} \cdot f'(r) \tag{9}$$

Beweis: Aus (8) folgt mit Produktregel, Quotientenregel und (6):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left[f'(r) \cdot \frac{x}{r}\right] = \frac{\partial f'(r)}{\partial x} \cdot \frac{x}{r} + f'(r)\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{x}{r}\right] \\
&= f''(r) \cdot \frac{x}{r} \cdot \frac{x}{r} + f'(r)\frac{r - x \cdot \frac{\partial r}{\partial x}}{r^2} = f''(r) \cdot \frac{x^2}{r^2} + f'(r)\frac{r - x \cdot \frac{x}{r}}{r^2} = f''(r) \cdot \frac{x^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - x^2}{r^3}
\end{aligned}$$

Analog ergibt sich

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = f''(r) \cdot \frac{y^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - y^2}{r^3}; \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = f''(r) \cdot \frac{z^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - z^2}{r^3}$$

und damit:

$$\begin{aligned}
\Delta f(r) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = f''(r)\left\{\frac{x^2}{r^2} + \frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2}\right\} + f'(r)\left\{\frac{r^2 - x^2}{r^3} + \frac{r^2 - y^2}{r^3} + \frac{r^2 - z^2}{r^3}\right\} \\
&= f''(r) \cdot \frac{r^2}{r^2} + f'(r) \cdot \frac{3r^2 - \left(x^2+y^2+z^2\right)}{r^3} = f''(r) + f'(r) \cdot \frac{2}{r} \qquad \square
\end{aligned}$$