

3 Ein Elektron im Potentialtopf

Ein Elektron befinde sich in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden bei $x = 0$ und $x = 1$. Dazwischen ist das Potential Null. Verwenden Sie für das folgende atomare Einheiten, d.h. $\hbar = 1$ und $m = 1$.

- Wie lautet die Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung für die Wellenfunktion $\Psi(x)$ im Intervall $0 \leq x \leq 1$?
- Welche Randbedingungen gelten bei $x = 0$ und $x = 1$?
- Lösen Sie das zugehörige Eigenwertproblem und ermitteln Sie die Eigenwerte E_n und Eigenfunktionen $\Phi_n(x)$.
- Entwickeln Sie die Beta-Verteilung $\Psi_0(x) = x^{a-1}(1-x)^{(b-1)}$ nach den Eigenfunktionen $\Phi_n(x)$.

$$\Psi_0(x) = \sum_{n=0}^N c_n \Phi_n(x) \quad .$$

Wie erhält man die Entwicklungskoeffizienten c_n ?

- Schreiben Sie ein Mathematica-Programm, das die Entwicklungskoeffizienten c_n numerisch berechnet.
- Das elektronische System werden im Zustandsvektor $\Psi_0(x)$ zur Zeit $t = 0$ präpariert. Welchen Wert hat dann die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ zur Zeit t ? (Hinweis: Nutzen Sie die Entwicklung des Anfangszustandes nach den Eigenfunktionen.)
- Schreiben Sie ein Mathematica-Programm zur Simulation dieser Zeitentwicklung.
- Wie muss der Anfangszustand geändert werden, damit der Zustand zu Beginn einen Strom trägt und wie ändert sich damit die Simulation?