

### 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?