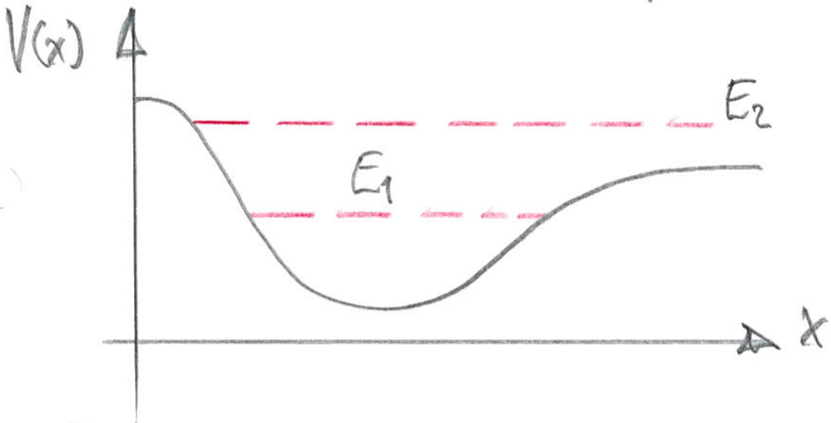
2. Eindimensionale Probleme der Wellenmechanik

Klassische Mechanik: Bewegung eines Punkt-Teilchens in einem Potenzial; klassisch erlaubte Bewegungen

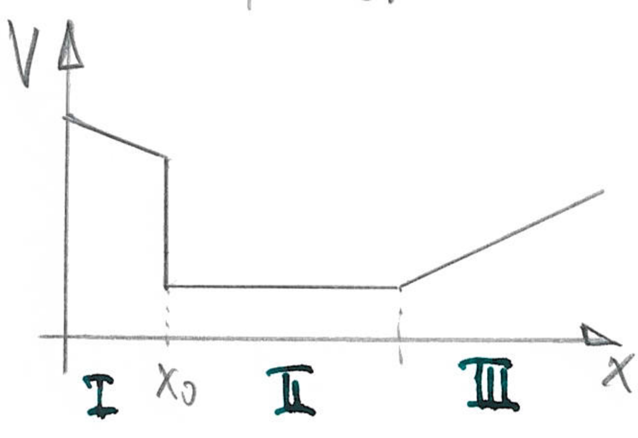


Quantenmechanische Beschreibung:
eindimensionale, zeitunabhängige Schrödinger-gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

mit der Normierungsbed.: $\int dx\, |\psi(x)|^2 = 1$

Potenziale mit Unstetigkeiten und / oder „Knicks“ sind erlaubt, z.B.



Verhalten von $\psi(x)$ an Unstetigkeiten ?

x_0 : $V(x_0)$ hat endliche Sprungstelle

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = [E - V(x)]\,\psi(x)$$

↷ ψ und ψ'' sind proportional zueinander

Annahme: $\psi(x)$ oder $\psi''(x)$ seien unstetig bei x_0:

$\psi(x) \sim \Theta(x-x_0) \Rightarrow \psi'(x) \sim \delta(x-x_0),\ \psi''(x) \sim \delta'(x-x_0)$

$\psi'(x) \sim \Theta(x-x_0) \Rightarrow \psi''(x) \sim \delta(x-x_0)$

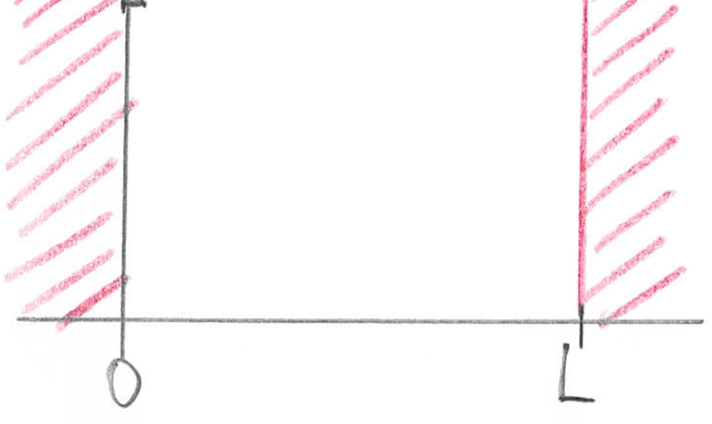
Dies ist inkonsistent mit der Forderung dass $V(x)$ höchstens eine endliche Sprungstelle bei x_0 haben soll.

$\Rightarrow$ $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ müssen stetig sein, d.h.

$\psi_I(x_0) = \psi_{II}(x_0)$ und $\psi'_I(x_0) = \psi'_{II}(x_0)$

$\Rightarrow$ Falls unendliche Sprungstellen in $V(x)$ zugelassen sind, muss die Forderung nach Stetigkeit von $\psi'(x)$ aufgegeben werden

2.1 Unendlich hoher Potenzialtopf



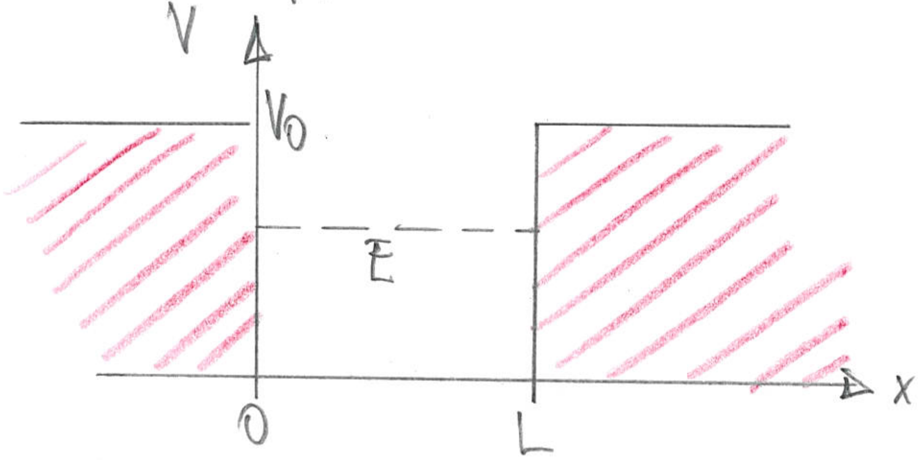
$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

"innen": $\psi_i(x)$, $0 \leq x \leq L$

"außen": $\psi_a(x)$, $x < 0$, $x > L$

Es gilt: $\psi_a(x) \equiv 0$

Um dies zu zeigen, betrachte zunächst den Fall eines Topfes mit endlicher Höhe:



$V_0 - E > 0$

Schrödingergleichung für ψ_a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_a'' = (E - V_0)\psi_a \ ; \quad \psi_a'' = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}_{= \varkappa^2 > 0}\psi_a$$

Also ist $\psi_a'' = \varkappa^2 \psi_a$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi_a(x) = A e^{\varkappa x} + B e^{-\varkappa x}$$

(c.f. "charakteristisches Polynom")

Betrachte den Bereich $x > L$. Hier gilt

$$\lim_{x \to \infty} \psi_a(x) = \infty \quad \text{falls nicht } A = 0.$$

Lösung ψ_a nur dann normierbar wenn $A=0$:

$$\psi_a = B e^{-\varkappa x} \quad , x > L$$

Nun betrachte Grenzübergang $V_0 \to \infty$

$$V_0 \to \infty \quad \Rightarrow \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \longrightarrow \infty$$

und daher $\psi_a = B e^{-\varkappa x} \longrightarrow 0$ für $V_0 \to \infty$.

⇒ Normierbarkeit und exponentieller Abfall für $V_0 \to \infty$ führt auf $\psi_a = 0$

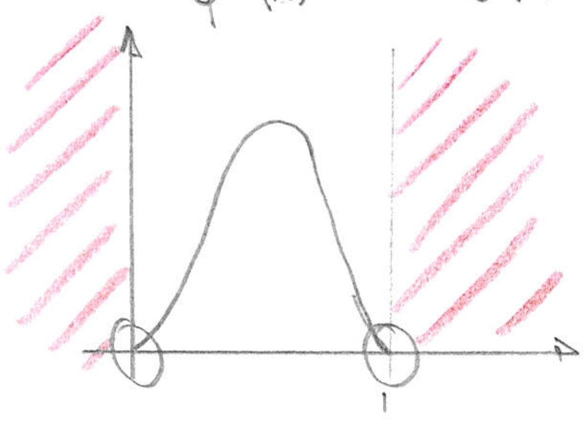
An den Wänden des unendlichen Potenzialtopfes gilt

$\psi(x)$ ist stetig bei $x = 0, L$

(kann man aus $\psi_i(L) = \psi_a(L)$ für endlichen V_0 folgern was auch im Grenzübergang $V_0 \to \infty$ gilt.)

Die Ableitung $\psi'(x)$ kann jedoch eine <u>endliche</u> Sprungstelle haben

$$\psi'(x) \sim \Theta(x-L) \quad \Rightarrow \quad \psi''(x) \sim \delta(x-L)$$



(ist verträglich mit unendlicher Sprunghöhe von $V(x)$ bei $x = L$)

$$\psi_i'(L) \neq \psi_a'(L)$$

Da $\psi_a \equiv 0$ genügt es die Schrödinger-Gleichung im Innern des Topfes zu lösen:

$$\psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad , \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

Lösung:
$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$
$$= \underbrace{(A+B)}_{\alpha} \cos kx + \underbrace{i(A-B)}_{\beta} \sin kx$$

Bestimme α, β aus Randbedingungen:

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = \beta \sin kx$$
$$\psi(L) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \quad , \quad n \in \mathbb{Z}$$

Da $\sin(-ax) = -\sin(ax)$ liefern negative n keine neue Lösung.
$n=0$ ist ausgeschlossen, da sonst $\psi(x) = 0 \ \forall x$, d.h. nicht nur für $x = L$

$\Rightarrow$ Lösung: $\psi_n(x) = \beta \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$, $n = 1, 2, 3, \dots$

- Wellenzahl k ist quantisiert: $k = \frac{n\pi}{L}$, $n = 1, 2, 3, \dots$
- Energiewerte: $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} n^2$
  $n = 1, 2, 3, \dots$

Quantenmechanische Behandlung führt auf

- diskretes Energiespektrum
- niedrigsten erlaubten Wert der Energie

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} > 0$$

nicht-verschwindende Nullpunktsenergie (typisch für Quantenmechanik)

Bestimme β aus Normierung der Lösung $\psi_n(x)$:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \beta^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx}_{= L/2}$$

$\left[\int \sin^2 y \, dy = \frac{1}{2}(y - \sin y \cos y) + C \right]$

$$\Rightarrow \quad \beta = \sqrt{2/L} \quad \text{und daher}$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots}$$

Bei der Lösung haben wir $E \geq 0$ vorausgesetzt [$E = 0$ führt auf triviale Lösung]

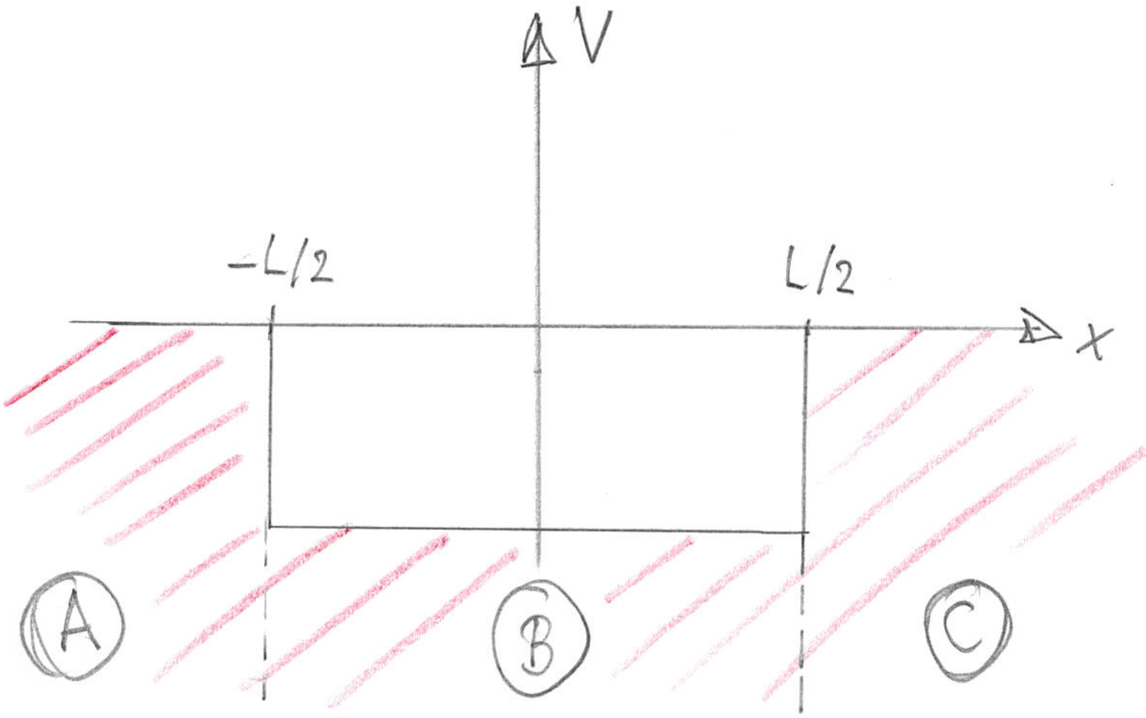
Existieren Lösungen mit negativer Energie?

$\longrightarrow$ Übungsaufgabe

2.2 Der endliche Potenzialtopf

Betrachte nun

$$V(x) = \begin{cases} -V_0\,, & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$



Modell für kurzreichweitige Kräfte, z. B. Deuteron (vereinfacht), Verhalten von Elektronen an abgeschirmten Störstellen in Festkörpern

Zu lösen:

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi(x)\,, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2\,dx = 1\,,$$

ψ, ψ' beide stetig bei $x = \pm L/2$

2.2.1 Gebundene Zustände

Gebundener Zustand: $E < 0$

(A), (C): $V(x) = 0$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \varkappa^2\psi, \quad \varkappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

(B): $V(x) = -V_0$

$$\psi'' = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi, \quad k^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} > 0$$

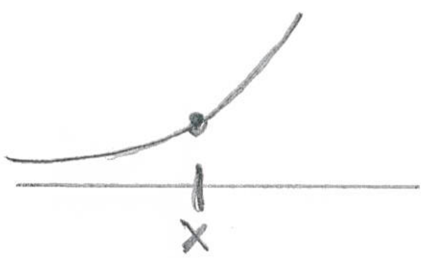
$$k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

Ist $E < -V_0$ zulässig?

Falls $E < -V_0$ ist $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0) < 0$

An Stellen wo $\psi(x) > 0$ ist $\psi''(x) = -k^2\psi(x) > 0$

$\Rightarrow \psi(x)$ ist konvex, d.h. ψ' ist monoton wachsend



Auf einer der beiden Seiten von x muss $\psi(x)$ überall konvex sein