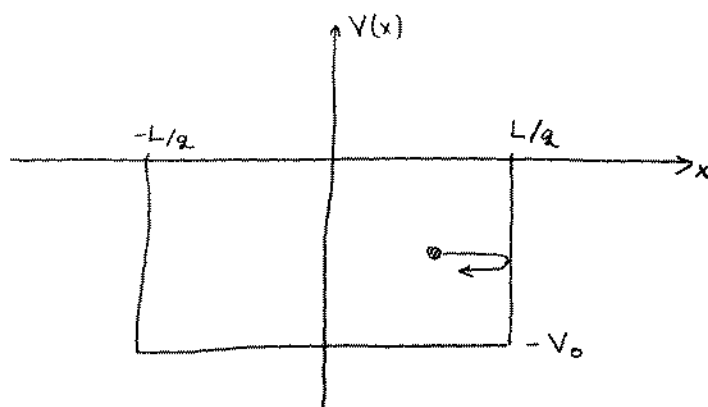


2. Eindimensionale Anwendungen

Wir betrachten jetzt etwas genauer einige Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in einer Dimension.

Auf einer Seite wird die Aufgabe damit mathematisch einfacher, auf der anderen Seite enthalten diese Lösungen schon sehr viel interessante Quantenphysik, wie wir sehen werden.

2.1 Teilchen im Kastenpotential [Münster 3.1, 3.2.1]



Schrödinger-Gleichung :
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_E(x) = E \Psi_E(x)$$

$$V(x) \equiv \begin{cases} -V_0, & |x| \leq \frac{L}{2} \\ 0, & |x| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

In der klassischen Mechanik: alle Energien $E > -V_0$ sind erlaubt.
Für $E < 0$ kann sich das Teilchen nur in der Gegend $|x| < \frac{L}{2}$ befinden.

Normierung :
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_E(x)|^2 = 1.$$

Strategie : Wir finden zuerst Lösungen in den Bereichen $|x| < \frac{L}{2}$, $x < -\frac{L}{2}$ und $x > \frac{L}{2}$, und binden sie dann mit bestimmten Anschlußbedingungen am $x = -\frac{L}{2}$ und $x = +\frac{L}{2}$ zusammen.

Notation : in diesem Kapitel wird angenommen, daß $E \leq 0$ gilt, und wir bezeichnen

$$E \equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} ; k > 0.$$

$$\underline{\underline{x < -\frac{L}{2}}}$$

$$\psi_E'' = \kappa^2 \psi_E$$

$$\Rightarrow \psi_E = A \cdot e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$$

$$\text{Normierbarkeit} \Rightarrow \psi_E(x \rightarrow \infty) = 0 \Rightarrow B = 0.$$

$$\underline{\underline{x > \frac{L}{2}}}$$

$$\psi_E'' = \kappa^2 \psi_E$$

$$\Rightarrow \psi_E = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}$$

$$\text{Normierbarkeit} \Rightarrow \psi_E(x \rightarrow \infty) = 0 \Rightarrow C = 0.$$

$$\underline{\underline{-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E'' - V_0 \psi_E = E \psi_E$$

$$\psi_E'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi_E$$

$$\text{Für } E > -V_0 \text{ ist } E + V_0 > 0. \text{ Wir bezeichnen } E + V_0 \equiv +\frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

$$\Rightarrow \psi_E'' = -k^2 \psi_E$$

$$\Rightarrow \psi_E = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

Anschlußbedingungen

- * Ist $\psi_E(x)$ nicht stetig, d.h. $\psi_E(x) = \varphi(x) + \gamma \Theta(x-x_0)$, dann gilt $\psi_E'(x) = \varphi'(x) + \gamma \delta(x-x_0)$, $\psi_E''(x) = \varphi''(x) + \gamma \delta'(x-x_0)$. Aber es gibt keine Deltafunktionen in $V(x)$
 $\Rightarrow \psi_E(x)$ muß stetig sein!

- * Ist $\psi_E'(x)$ nicht stetig, d.h. $\psi_E'(x) = \varphi(x) + \gamma \Theta(x-x_0)$, dann gilt $\psi_E''(x) = \varphi''(x) + \gamma \delta(x-x_0)$. Aber es gibt keine Deltafunktionen in $V(x)$
 $\Rightarrow \psi_E'(x)$ muß stetig sein!

Also:

$$\psi_E\left(-\frac{L}{2}^-\right) = \psi_E\left(-\frac{L}{2}^+\right) \Leftrightarrow A e^{-\frac{\kappa L}{2}} = F e^{-\frac{i\kappa L}{2}} + G e^{\frac{i\kappa L}{2}}$$

$$\psi_E'\left(-\frac{L}{2}^-\right) = \psi_E'\left(-\frac{L}{2}^+\right) \Leftrightarrow \kappa A e^{-\frac{\kappa L}{2}} = ik \left[F e^{-\frac{i\kappa L}{2}} - G e^{\frac{i\kappa L}{2}} \right]$$

$$\psi_E\left(\frac{L}{2}^-\right) = \psi_E\left(\frac{L}{2}^+\right) \Leftrightarrow D e^{-\frac{\kappa L}{2}} = F e^{\frac{i\kappa L}{2}} + G e^{-\frac{i\kappa L}{2}}$$

$$\psi_E'\left(\frac{L}{2}^-\right) = \psi_E'\left(\frac{L}{2}^+\right) \Leftrightarrow -\kappa D e^{-\frac{\kappa L}{2}} = ik \left[F e^{\frac{i\kappa L}{2}} - G e^{-\frac{i\kappa L}{2}} \right]$$

Um die Aufgabe einfacher zu machen, bemerken wir die Existenz einer bestimmten Symmetrie in unserem Problem:

Behauptung: Weil $V(-x) = V(x)$ gilt, impliziert $\psi_E(x)$ eine andere Lösung, $\tilde{\psi}_E(x) \equiv \psi_E(-x)$, die dieselbe Energie hat.

Beweis:
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \tilde{\psi}_E(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x) \right] \psi_E(-x) = E \psi_E(-x) = E \tilde{\psi}_E(x).$$

Konsequenz: Die Lösungen können als symmetrisch oder antisymmetrisch in $x \rightarrow -x$ gewählt werden, weil $\psi_E(x) + \psi_E(-x)$ und $\psi_E(x) - \psi_E(-x)$ auch Lösungen sind.

Symmetrische Lösungen

$$A \equiv D, \quad F \equiv G$$

$$\begin{cases} A e^{-\frac{\hbar k}{2}} = 2F \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \\ \text{oder } A e^{-\frac{\hbar k}{2}} = 2kF \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \Rightarrow \alpha L = k \cdot \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

Antisymmetrische Lösungen

$$A \equiv -D, \quad F \equiv -G$$

$$\begin{cases} A e^{-\frac{\hbar k}{2}} = -2iF \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \\ \text{oder } A e^{-\frac{\hbar k}{2}} = 2ikF \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \Rightarrow \alpha L = -k \cot\left(\frac{kL}{2}\right)$$

Hier sind $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $E + V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, d.h.

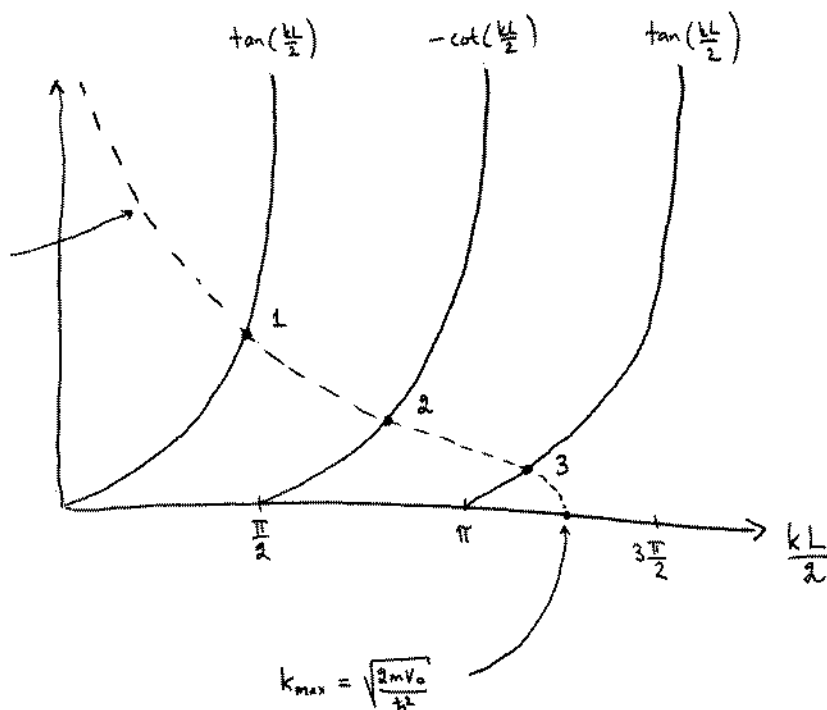
$$\frac{\alpha}{k} = \frac{\sqrt{-2mE/\hbar^2}}{\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}} = \sqrt{\frac{2mV_0/\hbar^2 - 2m(E+V_0)/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1} = \begin{cases} \tan\left(\frac{kL}{2}\right) & (\text{symmetrisch}) \\ -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) & (\text{antisymmetrisch}) \end{cases}$$

Diese sind transzendente Gleichungen für k , und damit für E !

Graphische Lösung:

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}$$



Fazit:

- * Das Energiespektrum ist diskret, und es gibt eine endliche Anzahl von Lösungen. Die Anzahl n hängt von V_0 und L ab:

$$(n-1) \cdot \frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \cdot \frac{L}{2} < n \cdot \frac{\pi}{2}$$

- * Es gibt jedoch immer mindestens eine Lösung (1). Diese Lösung hat eine symmetrische Wellenfunktion.

- * Die Wellenfunktionen sind nicht-verschwindend, wenn auch exponentiell klein, für $|x| > \frac{L}{2}$.

- * Die Wellenfunktion des Grundzustandes,

$$\Psi_{E_1}(x) = 2F \cos(k_1 x), \quad |x| < \frac{L}{2}$$

hat keine Knoten (Nullstellen), weil $\frac{k_1 L}{2} < \frac{\pi}{2}$ gilt.

Ohne Beweis: die Wellenfunktion $\Psi_{E_n}(x)$ besitzt $n-1$ Knoten.

