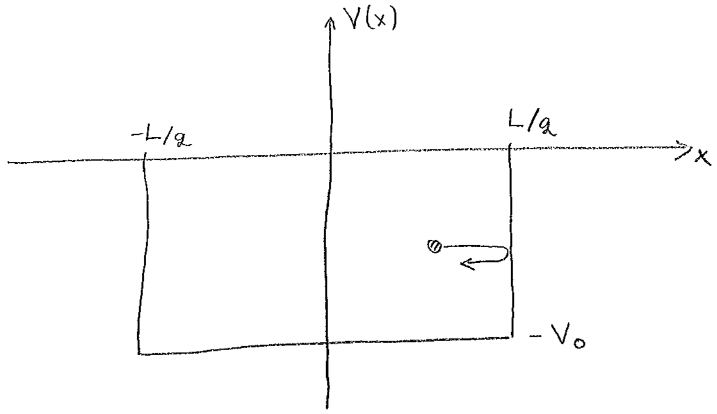
2. Eindimensionale Anwendungen

Wir untersuchen im Folgenden einige Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in einer Dimension. Auf einer Seite wird die Aufgabe damit mathematisch vereinfacht; auf der anderen Seite enthalten diese Lösungen schon sehr viel interessante Quantenphysik.

2.1 Teilchen im Kastenpotential [Fliessbach 11, 20; Griffiths 2.2, 2.6]



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

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

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

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

Strategie : Wir finden zuerst Lösungen in den Bereichen $x<-\frac{L}{2}$, $-\frac{L}{2}<x<\frac{L}{2}$, und $x>\frac{L}{2}$, und binden diese dann durch bestimmte Anschlussbedingungen bei $x=-\frac{L}{2}$ und $x=+\frac{L}{2}$ zusammen.

Notation : in diesem Kapitel wird angenommen, dass $E \le 0$ gilt, (gebundener Zustand) und wir bezeichnen

$$E =: -\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}\,; \quad \varkappa > 0.$$

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

$$\psi_E'' = \varkappa^2 \psi_E$$

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

Normierbarkeit $\Rightarrow \psi_E(x \to -\infty) = 0 \Rightarrow B = 0$.

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

$$\psi_E'' = \varkappa^2 \psi_E$$

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

Normierbarkeit $\Rightarrow \psi_E(x \to \infty) = 0 \Rightarrow C = 0$.

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

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

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

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

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

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

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 im $V(x)$

  $\Rightarrow \psi_E(x)$ 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 im $V(x)$

  $\Rightarrow \psi_E'(x)$ muss stetig sein!

Also:

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

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

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

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

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, $\tilde{\psi}_E(x) := \psi_E(-x)$, 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 $x \to -x$ gewählt werden, weil die Linearkombinationen $\psi_E(x) \pm \psi_E(-x)$ auch Lösungen sind.

Symmetrische Lösungen: $A \overset{!}{=} D$, $F \overset{!}{=} G$

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

Antisymmetrische Lösungen: $A \overset{!}{=} -D$, $F \overset{!}{=} -G$

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

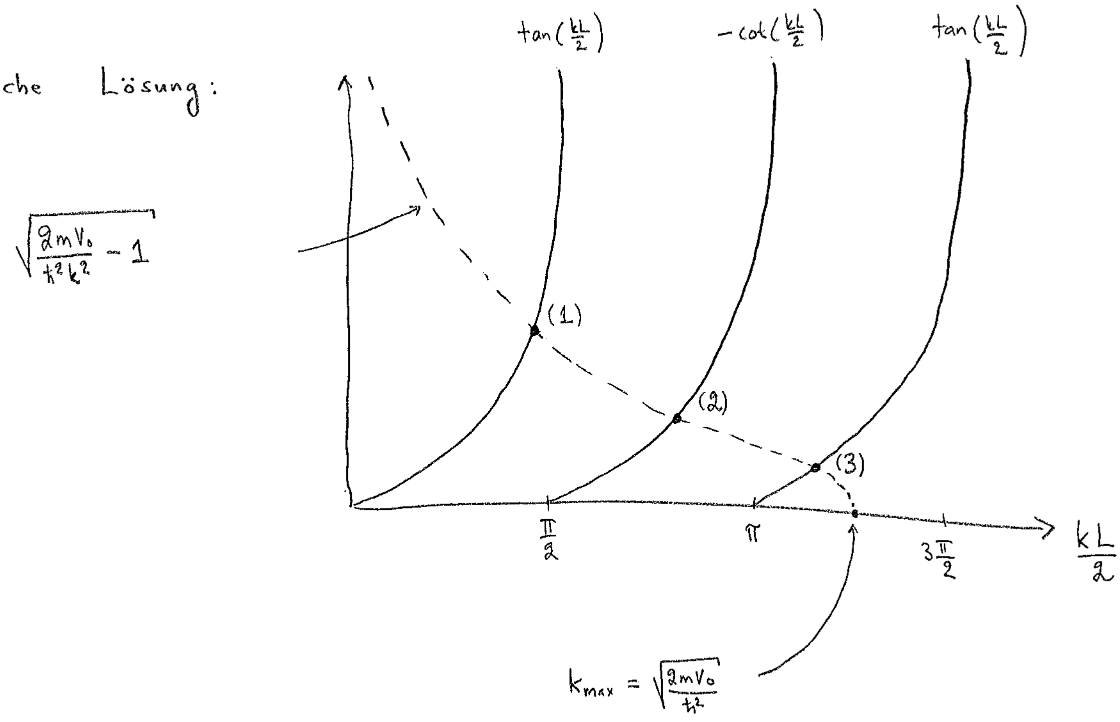
Hier sind $E = -\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}$, $E + V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, d.h.

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

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

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

Graphische Lösung:



Fazit:

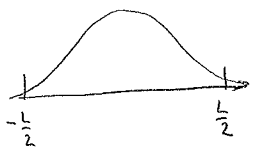
* Das Energiespektrum ist diskret, und es gibt eine endliche Anzahl von Lösungen. Die Anzahl n hängt von V_0 und L ab:

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

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

* 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.

— o —