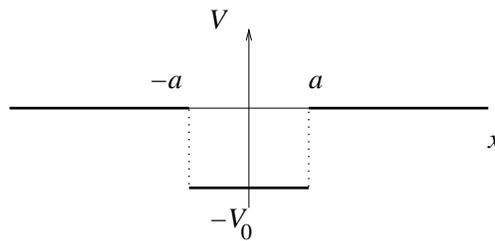


6.5 Stückweise konstantes Potential: Potentialtopf

Wir betrachten nun das stückweise konstante Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_0 & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$



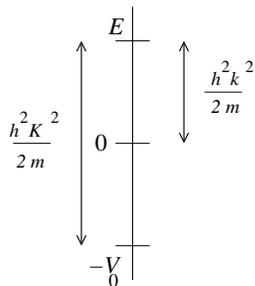
Aus den allgemeinen Bemerkungen geht hervor, dass

- Energie-Eigenwerte sind $\geq -V_0$.
- ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ stetig bei $x = \pm a$ (Anschlussbedingungen).
- Das Potential V ist symmetrisch: Eigenfunktionen $\psi_E(x)$ können gerade/ungerade gewählt werden. (Aber müssen nicht, wenn der Eigenwert E entartet ist!)

Spektrum für $E \geq 0$

Sei $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$, dann $K^2 = k^2 + K_0^2$.

Allgemeine Lösung der Eigenwertgleichung:



$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) & x < -a \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (Ce^{iKx} + De^{-iKx}) & -a < x < a \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}) & x > a \end{aligned}$$

(Faktoren $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ sind nur da, um spätere Darstellungen zu vereinfachen.)

Da $\psi(x)$ nicht $\rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$ sind diese Lösungen nicht normierbar, Wir erwarten deshalb eine Delta-Funktion-Normierung und ein kontinuierliches Spektrum.

Die Anschluss-Bedingungen bei $x = \pm a$ legen vier der sechs Koeffizienten A, B, C, D, F und G fest. Zwei Koeffizienten können frei gewählt werden. Deshalb gibt es bei jeder Energie E zwei linear unabhängige Eigenfunktionen. \Rightarrow Das Energiespektrum für $E > 0$ ist zweifach entartet.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die zwei "Basisfunktionen" zum Energie-Eigenwert E zu wählen.

- In der Streutheorie wählt man Basisfunktionen

$$\psi_{kR}^+ \text{ mit } A = 1, G = 0 \quad \psi_{kL}^+ \text{ mit } A = 0, G = 1$$

Aus den Anschlussbedingungen findet man, dass

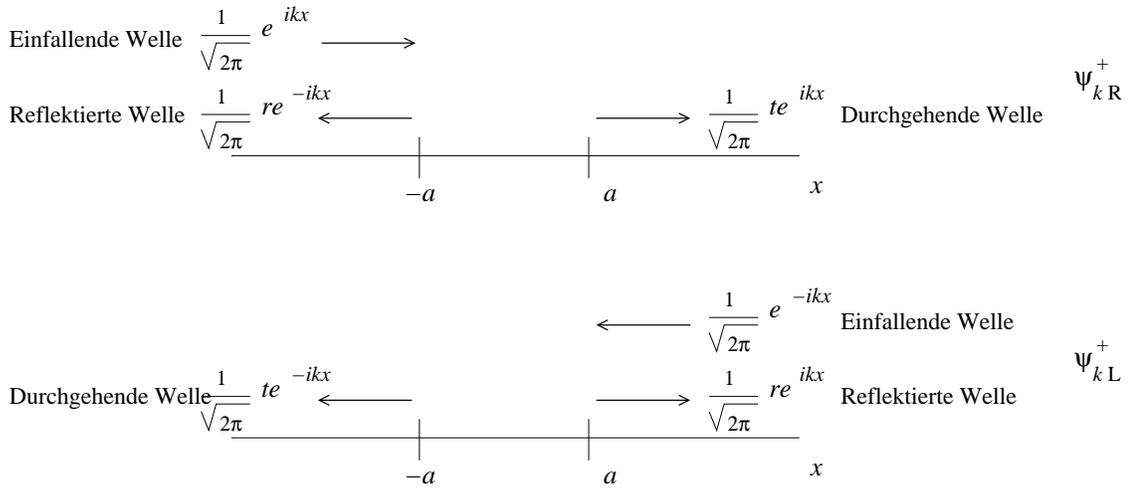
$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{-iKa} + De^{iKa}, \\ Ake^{-ika} - Bke^{ika} &= CKe^{-ika} - DKe^{ika}, \\ Fe^{ika} + Ge^{-ika} &= Ce^{iKa} + De^{-iKa}, \\ Fke^{ika} - Gke^{-ika} &= CKe^{iKa} - DKe^{-iKa}. \end{aligned}$$

Hieraus folgt, dass

$$\begin{aligned} B &= r \\ &= \frac{-i(k^2 - K^2) \sin(2Ka)}{2kK \cos(2Ka) - i(k^2 + K^2) \sin(2Ka)} e^{-2ika}, \\ F &= t \\ &= \frac{2kK}{2kK \cos(2Ka) - i(k^2 + K^2) \sin(2Ka)} e^{-2ika} \end{aligned}$$

für ψ_{kR}^+ und $B = t, F = r$ für ψ_{kL}^+ .

Man kann diese zwei Basis-Funktionen so darstellen:



Die Koeffizienten r und t werden ‘‘Reflektionsamplitude’’ und ‘‘Transmissionsamplitude’’ genannt. Die Tatsache, dass ψ_{kR}^+ und ψ_{kL}^+ die gleiche Reflektions- und Transmissionsamplituden haben, ist nicht allgemein. Sie folgt hier, weil $V(x) = V(-x)$.

Normierung der stationären Zustände ψ_{kL}^+ und ψ_{kR}^+ : $(\psi_{kL}^+, \psi_{k'L}^+) = (\psi_{kR}^+, \psi_{k'R}^+) = \delta(k - k')$, $(\psi_{kL}^+, \psi_{k'R}^+) = 0$.

Beweis: Sehr mühsam. In QM2 wird die δ -Normierung für allgemeine $V(x)$ bewiesen.

Die Energie-Eigenzustände haben δ -Funktion Normierung \Rightarrow sie stellen keine physikalischen Zustände dar! Man bildet einen normierten Zustand durch kontinuierliche Superposition der stationären Zustände ψ_{kR}^+ oder ψ_{kL}^+ (Wellenpaket).

Allgemeines Wellenpaket aus ψ_{kR}^+ :

$$\psi(x, t) = \int dk \phi(k) \psi_{kR}^+(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}.$$

Wir wählen $\phi(k)$ so, dass die Funktion $\phi(k)$ ein scharfes Maximum bei $k = k_0$ hat, und reell ist. Wir werden nun $\psi(x, t)$ durch Wellenpakete $\psi_{\rightarrow}(x, t)$ und $\psi_{\leftarrow}(x, t)$ für ein freies Teilchen mit Impuls $\pm \hbar k_0$ ausdrücken,

$$\begin{cases} \psi_{\rightarrow}(x, t) = \int dk \phi(k) \psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \\ \psi_{\leftarrow}(x, t) = \int dk \phi(k) \psi_{-k}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \end{cases}$$

Dies gibt, für $x < -a$:

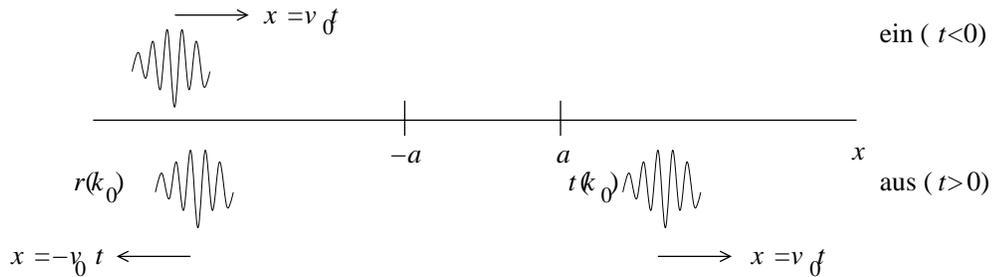
$$\psi(x, t) = \int dk \phi(k) (\psi_k(x) + r(k)\psi_{-k}(x)) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$$

Da $\phi(k)$ ein scharfes Maximum bei $k = k_0$ hat, kann man $r(k)$ durch $r(k_0)$ im Integranden ersetzen,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\approx \int dk \phi(k) (\psi_k(x) + r(k_0)\psi_{-k}(x)) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \\ &= \psi_{\rightarrow}(x, t) + r(k_0)\psi_{\leftarrow}(x, t). \end{aligned}$$

Ebenso findet man für $x > a$, dass

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dk \phi(k) t(k)\psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \\ &\approx t(k_0)\psi_{\rightarrow}(x, t). \end{aligned}$$



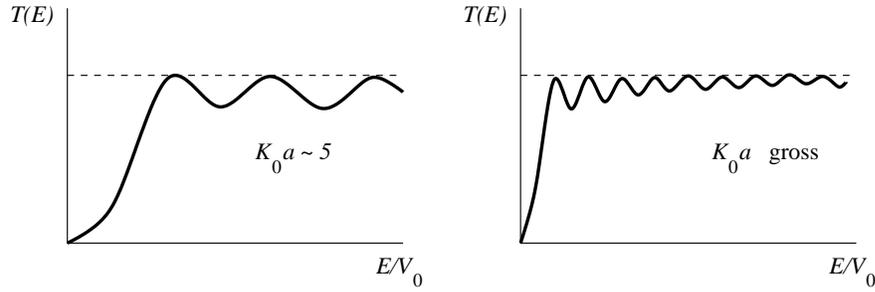
Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen vom Potentialtopf reflektiert wird, ist

$$R = |r(k_0)|^2$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen durchgelassen wird, ist

$$T = |t(k_0)|^2$$

Wichtige Beobachtung: R und T werden aus Eigenschaften von stationären, δ -Funktion normierten Wellenfunktionen $\psi_{kR}^+(x)$ berechnet, auch wenn sie die Reflexion oder Transmission eines nicht-stationären, normierten Wellenpakets darstellen! (Dies ist ein erstes Beispiel dafür, dass es bei Berechnungen oft vorteilhaft ist, δ -Funktion normierte Wellenfunktionen zu verwenden, auch wenn physikalische Zustände nur durch normierte Zustände gegeben werden.)



Bemerkung: Man kann auch Basisfunktionen wählen, die zur gleichen Zeit Paritäts-Eigenfunktionen sind. In diesem Fall findet man

$$\begin{aligned} \psi_{kG}(x) : \text{ gerade} & \quad A = G = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi_g} \text{ und } B = F = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_g}, \\ \psi_{kU}(x) : \text{ ungerade} & \quad A = G = -\frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\phi_u} \text{ und } B = F = \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\phi_u}, \end{aligned}$$

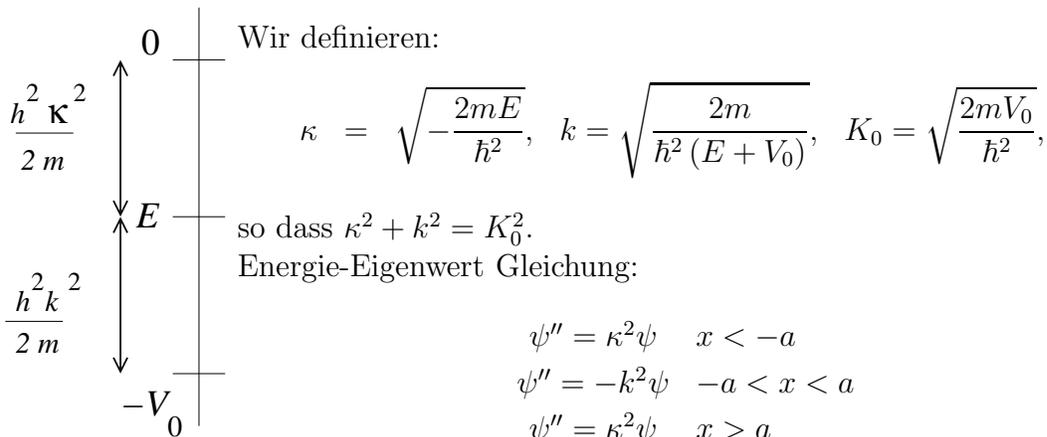
wobei die Phasenverschiebung ϕ_g bzw. ϕ_u durch

$$\begin{aligned} e^{2i\phi_g} &= \frac{2kK - i(k^2 - K^2) \sin 2Ka}{2kK \cos 2Ka - i(k^2 + K^2) \sin 2Ka} e^{-2ika}, \\ e^{2i\phi_u} &= \frac{2kK + i(k^2 - K^2) \sin 2Ka}{2kK \cos 2Ka - i(k^2 + K^2) \sin 2Ka} e^{-2ika} \end{aligned}$$

gegeben wird.

$$\begin{array}{ccc} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(kx - \phi_g) & \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(kx + \phi_g) & \Psi_{kR}^+ \\ \hline & | \quad | & \\ & -a \quad a \quad x & \\ \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(kx - \phi_g) & \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(kx + \phi_g) & \Psi_{kL}^+ \\ \hline & | \quad | & \\ & -a \quad a \quad x & \end{array}$$

Spektrum für $-V_0 \leq E < 0$



Die allgemeine, normierbare Lösung dieser Gleichung lautet:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{\kappa x} & x < -a \\ \psi(x) &= C \cos kx + D \sin kx & -a < x < a \\ \psi(x) &= Ge^{-\kappa x} & x > a \end{aligned}$$

Da das Potential $V(x)$ symmetrisch ist, gibt es gerade und ungerade Lösungen.

- Gerade Lösungen: $A = G$, $D = 0$. Dann

$$\begin{aligned} \psi(x \uparrow a) = \psi(x \downarrow a) &\Rightarrow Ae^{-\kappa a} = C \cos ka \\ \psi'(x \uparrow a) = \psi'(x \downarrow a) &\Rightarrow -\kappa Ae^{-\kappa a} = -kC \cos ka \end{aligned}$$

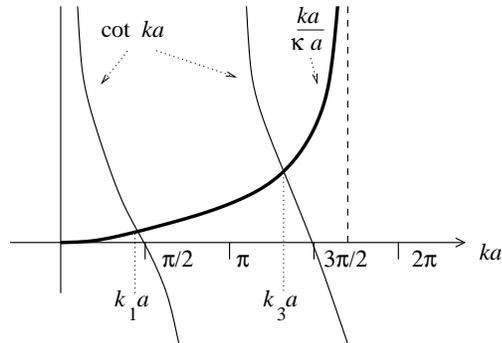
oder, in Matrixnotation,

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -\cos ka \\ -\kappa e^{-\kappa a} & k \sin ka \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Diese Gleichungen haben eine nichttriviale Lösung nur, wenn

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} e^{-\kappa a} - \cos ka \\ -\kappa e^{-\kappa a} k \sin ka \end{pmatrix} &= e^{-\kappa a} (k \sin ka - \kappa \cos ka) = 0 \\ \Leftrightarrow \cot ka &= \frac{ka}{\kappa a} = \frac{l}{\sqrt{K_0^2 - k^2}} \end{aligned}$$

Schematisch kann man die beiden Seiten der Gleichung so darstellen:

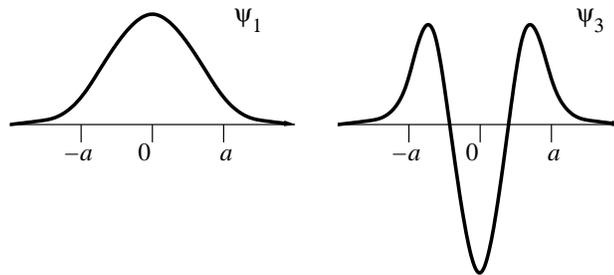


Diese Gleichung hat nur diskrete Lösungen. Sie werden mit k_1, k_3, k_5, \dots bezeichnet. Je größer K_0a , desto mehr Lösungen. Es gibt mindestens eine Lösung; Die Zahl der Lösungen ist n_g für $(n_g - 1)\pi < K_0a < n_g\pi$.

Die Energie-Eigenfunktionen haben dann folgende Form:

$$\psi_i(k) = \begin{cases} C \cos k_i a e^{\kappa_i(a+x)} & x < -a, \\ C \cos k_i x & -a < x < a, \\ C \cos k_i a e^{\kappa_i(a-x)} & x > a. \end{cases}$$

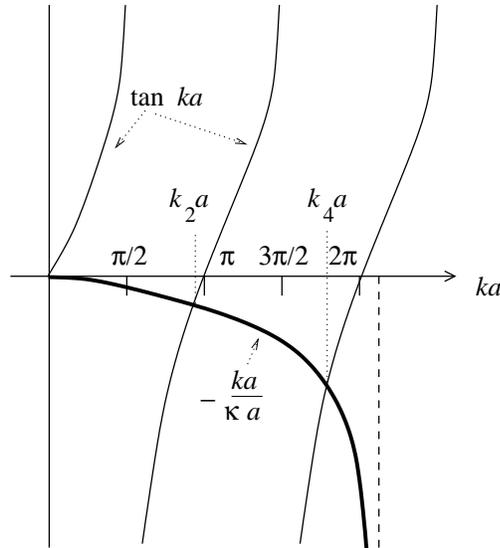
Hier $\kappa_i = \sqrt{K_0^2 + k_i^2}$ und C ist eine Normierungskonstante, so dass $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$. Schematisch sehen die ersten zwei Lösungen so aus:



- Ungerade Lösungen: $A = -G, C = 0$.

$$\dots \Rightarrow \tan ka = -\frac{ka}{\kappa a} = \frac{k}{\sqrt{K_0^2 - k^2}}$$

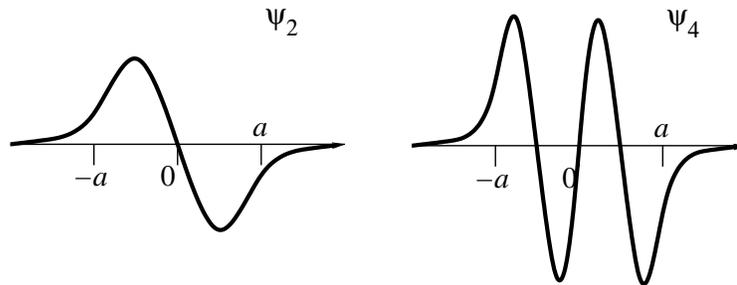
Die beiden Seiten der Gleichung sehen nun so aus:



Die diskreten Lösungen werden mit k_2, k_4, \dots bezeichnet. Die Energie-Eigenfunktionen haben die Form

$$\psi_2(k) = \begin{cases} D \sin k_2 a e^{\kappa_i(a+x)} & x < -a \\ D \sin k_2 x & -a < x < a \\ D \sin k_2 a e^{\kappa_i(a-x)} & x > a \end{cases},$$

wobei D eine Normierungskonstante ist. Es gibt nur eine ungerade Lösung, wenn $K_0 a > \frac{\pi}{2}$; Im allgemeinen gibt es n_u ungerade Lösungen, wenn $(n_u - 1/2)\pi < K_0 a < (n_u + 1/2)\pi$. Die ersten zwei ungeraden Lösungen sehen so aus:



Zusammenfassend: Für $-V_0 < E < 0$ ist das \hat{H} -Spektrum diskret. Die Energie-Eigenwerte sind

$$E_i = -V_0 + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}, \quad i = 1, \dots, n,$$

mit $n = n_u + n_g$ die Zahl der gebundenen Zustände. Aus dem Vorherigen folgt, dass n die ganze Zahl ist, wofür gilt, dass $(n - 1)(\pi/2) < K_0 a \leq n(\pi/2)$. Ist i gerade, so gilt $\psi_i(x) = \psi_i(-x)$ ein gerader Zustand; ist i ungerade, so ist $\psi_i(x) = -\psi_i(-x)$ ein ungerader Zustand.

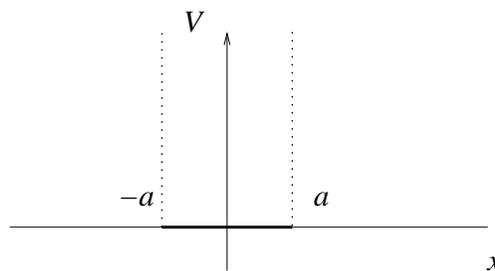
Bemerkungen:

- Die Zustände $|\psi_i\rangle$ sind normierbare, stationäre Zustände und Wahrscheinlichkeitsverteilungen von beliebigen Observablen sind zeitunabhängig in dem Zustand $|\psi_i\rangle$.
- Die Zustände $|\psi_i\rangle$ sind “gebunden”. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei $|x| > a$ zu finden $\rightarrow 0$ wenn $|x| \rightarrow \infty$. Aber im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei $|x| > a$ zu finden nicht null.
- Wenn $V_0 \rightarrow \pm\infty$, dann $k_i \rightarrow \frac{i\pi}{2a}$, $E_i + V_0 \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 i^2$. Bei gleichbleibendem Index i wird die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen außerhalb des Potentialtopfes zu finden, beliebig klein wenn $V_0 \rightarrow \infty$.

6.6 Teilchen im Kasten

Als zweites Beispiel betrachten wir nun das stückweise konstante Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \rightarrow \infty & x < -a \\ 0 & -a < x < a \\ V_0 \rightarrow \infty & x > a \end{cases}$$



Es gibt zwei Methoden, um das Spektrum des Hamilton-Operators $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ zu bestimmen:

1. Man bemerkt, dass das Potential $V(x)$ im Vergleich zum im vorigen Abschnitt beschriebenen Potential um V_0 verschoben ist. Daher übernimmt man die Ergebnisse vom

Potentialtopf für $E < 0$, verschiebt aber alle Energie-Eigenwerte um V_0 . Das Ergebnis ist

$$E_i = E_i^{\text{PT}} + V_0,$$

wobei E_i^{PT} die Energie-Eigenwerte des Potentialtopfes sind. Für den Potentialtopf fanden wir, dass

$$E_i^{\text{PT}} = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 i^2, \quad i = 1, 2, 3, \dots,$$

mit $V_0 \rightarrow \infty$. Hieraus folgt, dass die Energie-Eigenwerte für das Teilchen im Kasten von der Gleichung

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 i^2, \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

gegeben werden.

2. Im Limes $V_0 \rightarrow \infty$ muss gelten, dass $\psi(x) = 0$ für $x < -a$ und $x > a$. \Rightarrow Energie-Eigenwert Gleichung wird

$$\begin{cases} \psi'' = -k^2\psi & \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \psi(\pm a) = 0 \end{cases}$$

Lösung:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos k_i x && \text{gerade} \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k_i x && \text{ungerade} \end{aligned}$$

Aus $\psi(\pm a) = 0$ folgt dann, dass

$$\begin{aligned} k_i &= \frac{\pi}{2a} i && i = 1, 2, 3, \dots \\ E_i &= \frac{\hbar^2}{2m} k_i^2 \end{aligned}$$

Es gilt: Ist i ungerade, so gilt $\psi_i(x) = \psi_i(-x)$; ist i gerade, ist $\psi_i(x) = -\psi_i(-x)$.