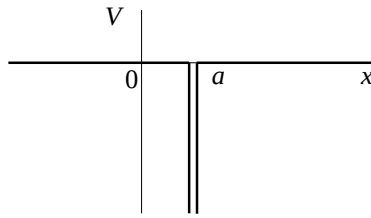


6.7 Delta-Funktion Potentialbarriere

Betrachten wir nun eine (negative) δ -Funktion Potentialbarriere mit dem Potential

$$V(x) = -v_0 \delta(x - a).$$



Es gibt zwei Lösungsmethoden um die stationären Zustände mit $E > 0$ zu finden.

1. Wir ersetzen $V(x)$ durch eine Darstellung der δ -Funktion,

$$V_\eta(x) = \begin{cases} -\frac{v_0}{\eta} & \text{für } |x - a| < \eta, \\ 0 & \text{für } |x - a| > \eta. \end{cases}$$

Das Potential $V_\eta(x)$ beschreibt einen Potentialtopf. Die Energie-Eigenzustände für dieses Potential haben wir schon berechnet. Zu jedem Eigenwert $E = \hbar^2 k^2 / 2m > 0$ gibt es zwei linear abhängigen Lösungen. Für $a = 0$ sind diese Lösungen:

$$\begin{aligned} \psi_{kR}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times \begin{cases} (e^{ikx} - r e^{-ikx}) & \text{für } x < -\eta, \\ t e^{ikx} & \text{für } x > \eta. \end{cases}, \\ \psi_{kL}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times \begin{cases} t e^{-ikx} & \text{für } x < -\eta, \\ (e^{-ikx} - r e^{ikx}) & \text{für } x > \eta. \end{cases}, \end{aligned}$$

wobei

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

und

$$K = \sqrt{k^2 + \frac{2mv_0}{\hbar^2}}.$$

Im Limes $\eta \downarrow 0$ findet man dann:

$$r = \frac{imv_0/\hbar^2}{k - imv_0/\hbar^2}, \quad t = \frac{k}{k - imv_0/\hbar^2}.$$

Erläuterung: Im Limes $\eta \downarrow 0$ gilt, dass $K \rightarrow \infty$ aber $K\eta \rightarrow 0$. Daher gilt, dass $\sin(2K\eta) \rightarrow 2K\eta$ und $K \sin(2K\eta) \rightarrow 2K^2\eta \rightarrow 2mv_0/\hbar^2$.

Für allgemeine a findet man die Lösungen dadurch, dass man die obenstehende Lösungen für $x = 0$ um a verschiebt.

2. Direkte Methode: Die Anschlussbedingungen für ein δ -Funktion Potential sind:

$$\psi(x) \text{ stetig für } x = a, \quad \lim_{x \uparrow a} \frac{d\psi}{dx} - \lim_{x \downarrow a} \frac{d\psi}{dx} = \frac{2mv_0}{\hbar^2} \psi(a).$$

Erläuterung: Aus der Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - v_0 \delta(x - a) \psi = E\psi$$

folgt, nach Integration von $x = a - \eta$ bis $x = a + \eta$, mit $\eta \downarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi(a + \eta)}{dx} - \frac{d\psi(a - \eta)}{dx} \right) - v_0 \psi(a) = 0,$$

woraus man schliesst, dass

$$\frac{d\psi(a - \eta)}{dx} = \frac{d\psi(a + \eta)}{dx} + \frac{2mv_0}{\hbar^2} \psi(a).$$

Die allgemeine Lösung für die Energieeigenzustände für $x < a$ und $x > a$ lautet:

$$\begin{aligned} x < 0 : \quad \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}) \\ x > 0 : \quad \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (Ce^{ik(x-a)} + De^{-ik(x-a)}), \end{aligned}$$

wobei $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Die Anschlussbedingungen führen zu zwei Gleichungen für die vier Koeffizienten A , B , C und D ,

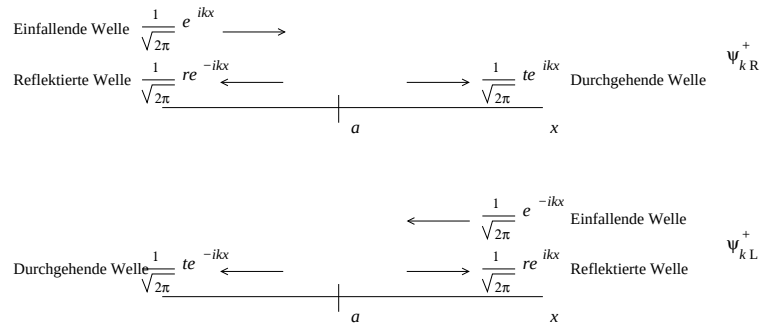
$$A + B = C + D, \quad ik(A - B) = ik(C - D) + \frac{2mv_0}{\hbar^2}(A + B)$$

Vier Unbekannte, zwei Gleichungen: Damit ist der Energieeigenwert E zweifach entartet. Man wählt linear unabhängige Eigenzustände als

$$\psi_{kR} : \text{ mit } A = 1 \ D = 0, \quad \psi_{kL} : \text{ mit } A = 0 \ D = 1.$$

Dann, für ψ_{kR} :

$$B = r = \frac{imv_0}{\hbar^2 k - imv_0} \quad C = t = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k - imv_0}.$$



Bemerkungen: (1) Die Ergebnisse gelten auch für negativen v_0 , d.h., für eine positive Potentialbarriere. (2) Für ψ_{kL} findet man: $B = t$, $C = r$. Im Grenzübergang $v_0 \rightarrow \pm\infty$ wird $r \rightarrow -1$ und $t \rightarrow 0$, es findet also keine Transmission statt bei unendlich tiefer bzw. hoher Potentialbarriere.

7 Harmonischer Oszillator

7.1 Formulierung des Eigenwertproblems

Der eindimensionale harmonische Oszillator wird durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

beschrieben, wobei $\hat{p} = \hbar\hat{k}$ und ω die Frequenz des Oszillators ist. Es ist vorteilhaft, zu dimensionslosen Koordinaten

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_0} \quad \text{mit} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

zu wechseln. Dann gilt auch, dass

$$\hat{k} = -i\frac{d}{dx} = -\frac{i}{x_0}\frac{d}{d\tilde{x}} = \frac{\hat{\tilde{k}}}{x_0}.$$

Die dimensionslose Zustandsfunktion $\tilde{\psi}$ wird dann durch

$$\tilde{\psi}(\tilde{x}) = \sqrt{x_0}\psi(x)$$

gegeben. Diese Funktion ist normiert in Bezug auf die dimensionlosen Koordinaten $\tilde{x}$,

$$(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2) = \int d\tilde{x} \tilde{\psi}_1(\tilde{x})^* \tilde{\psi}_2(\tilde{x}) = \int dx \psi_1(x) \psi_2(x) = (\psi_1, \psi_2).$$

Mit Hilfe des Kommutators

$$[\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{k}}] = \hat{\tilde{x}}\hat{\tilde{k}} - \hat{\tilde{k}}\hat{\tilde{x}} = i\hat{1}$$

wird der Hamilton-Operator nun als

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\hat{\tilde{k}}^2 + \hat{\tilde{x}}^2 \right) = \hbar\omega \left[\frac{1}{2} \left(\hat{\tilde{x}} - i\hat{\tilde{k}} \right) \left(\hat{\tilde{x}} + i\hat{\tilde{k}} \right) + \frac{1}{2} \right] = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

geschriebe, wobei

$$\hat{n} = \frac{1}{2} \left(\hat{\tilde{x}} - i\hat{\tilde{k}} \right) \left(\hat{\tilde{x}} + i\hat{\tilde{k}} \right).$$

Es müssen nun die Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ gefunden werden.

7.2 Wichtigste Ergebnisse

Wir stellen zuerst die Ergebnisse vor, und werden dann die Herleitung besprechen.

1. Die Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ sind die ganzen Zahlen $n = 0, 1, 2, \dots$
2. Die Eigenwerte sind nicht entartet.
3. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind

$$\tilde{\psi}_n(\tilde{x}) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2}.$$

In der Mathematik definiert man die “Hermite-Polynome” H_n durch

$$H_n(y) = e^{\frac{y^2}{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

Damit schreibt man

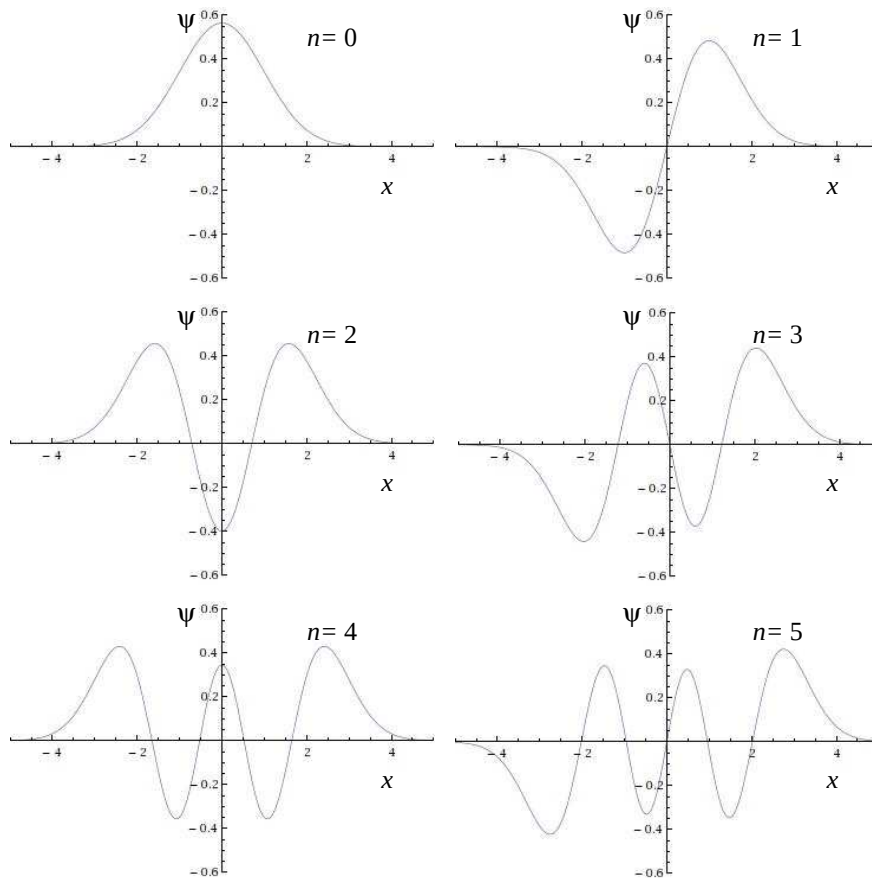
$$\tilde{\psi}_n(\tilde{x}) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\tilde{x}) e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2}.$$

Wenn wir diese Ergebnisse nun in den ursprünglichen Koordinaten darstellen, finden wir:

1. Die Energieeigenwerte des eindimensionalen harmonischen Oszillators sind $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$,
2. Die Energieeigenwerte sind nicht entartet,
3. Die Eigenzustände sind

$$\psi_n(x) = x_0^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}.$$

In der Dirac Notation werden die Eigenkets üblicherweise durch Kets $|n\rangle$ dargestellt. Da die Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ nicht entartet sind, bilden die Kets $|n\rangle$ eine Basis für den Hilbertraum $\mathcal{H}$.



7.3 Eigenschaften des Grundzustandes

Im Grundzustand $|0\rangle$ ist die Energie des harmonischen Operators nicht null:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad .$$

Diese Nullpunktsenergie ist die kleinste Energie, die mit der Heisenbergschen Unschärferelation vereinbar ist.

Beweis: Aus $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ und (aus Symmetriegründen) $\bar{x} = 0, \bar{p} = 0$ folgt:

$$\overline{x^2} \overline{p^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{oder} \quad \overline{x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{p^2}}$$

Damit ergibt sich

$$\overline{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} \geq \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar^2}{4\overline{p^2}} = \frac{1}{2m} \left(\sqrt{\overline{p^2}} - \frac{\hbar m\omega}{2\sqrt{\overline{p^2}}} \right)^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Der erste Term ist nicht-negativ; er ist null bei $\overline{p^2} = m\hbar\omega/2$. Hieraus ergibt sich dann die Aussage, dass die Nullpunktsenergie $E_0 = \hbar\omega/2$ die kleinste Energie ist, die mit der Heisenbergschen Unschärferelation vereinbar ist, und dass $\overline{p^2} = m\hbar\omega/2$ im Grundzustand.

Die Zustandsfunktion des Grundzustandes ist (in dimensionslosen Koordinaten):

$$\tilde{\psi}(\tilde{x}) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}}$$

Dann ist die Wahrscheinlichkeitsdichte des dimensionslosen Ortes $\tilde{x}$ durch

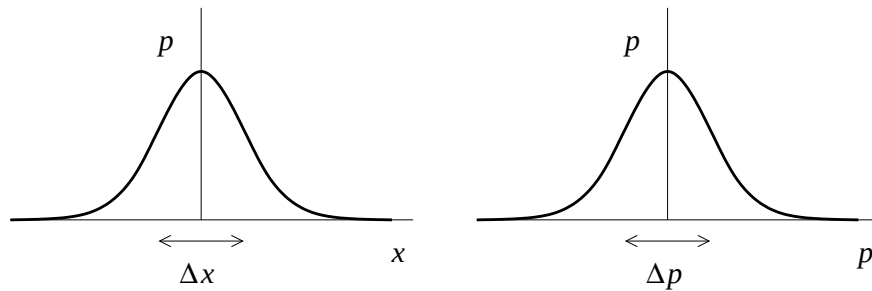
$$p(\tilde{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\tilde{x}^2}$$

gegeben: Eine Gaußverteilung. Die Wahrscheinlichkeitsdichte des Ortes x ist dann

$$p(x) = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} e^{-x^2/x_0^2}.$$

Der Erwartungswert und die Abweichung sind

$$\overline{x} = 0, \quad \Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$



Die Fourier-Transformierte Zustandsfunktion ist

$$\tilde{\psi}(\tilde{k}) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\tilde{k}^2}{2}}.$$

Hieraus folgt, dass

$$p(\tilde{k}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\tilde{k}^2}$$

und, mit $p = \hbar \tilde{k} / x_0$,

$$p(p) = \frac{x_0}{\hbar \sqrt{\pi}} e^{-p^2 x_0^2 / \hbar^2}.$$

Auch der Impuls hat eine Gaußverteilung im Grundzustand. Erwartungswert und Abweichung sind

$$\bar{p} = 0, \quad \Delta p = \frac{\hbar}{x_0 \sqrt{2}} = \sqrt{\frac{m \hbar \omega}{2}}.$$

Im Grundzustand gilt deshalb, dass

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

Dies ist die minimale Unschärfe in Bezug auf die Heisenbergsche Unschärferelation.

7.4 Mathematische Hintergründe

Wir lösen nun das Eigenwertproblem für den Operator

$$\hat{n} = \frac{1}{2} (\hat{x} - i\hat{k}) (\hat{x} + i\hat{k}),$$

wobei $\hat{k} = -i d/dx$. Es wird bewiesen:

1. Die Zahlen $n = 0, 1, 2, \dots$ treten als Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ auf;
2. Diese Eigenwerte sind nicht entartet;
3. Die Eigenfunktionen sind

$$E_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2}.$$

In dieser Lösung brauchen wir einen weiteren Operator,

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{k}),$$

und seinen hermitesch konjugierten

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{k}).$$

Mit Hilfe dieser Operatoren kann der Operator $\hat{n}$ als $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ geschrieben werden.

Die Behauptungen 1—3 werden nun in drei Schritten bewiesen:

- (a) Es wird gezeigt, dass wenn n ein Eigenwert des Operators $\hat{n}$ und $E_n(x)$ die zugehörige Eigenfunktion ist, dann $n \geq 0$; Es gilt $n = 0$ nur wenn $\hat{a}E_0(x) = 0$. Diese Differentialgleichung hat nur eine Lösung (bis auf Multiplikation mit einer komplexen Zahl), woraus man schliesst das $n = 0$ ein nicht-entarteter Eigenwert des Operators n ist.
- (b) Wenn n ein Eigenwert des Operators $\hat{n}$ und $E_n(x)$ die zugehörige normierte Eigenfunktion ist, dann ist

$$E_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger E_n(x)$$

eine normierte Eigenfunktion zum Eigenwert $n+1$. Da $n=0$ ein Eigenwert ist, ergibt sich, dass alle ganzen Zahlen $n=0, 1, 2, \dots$ Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ sind, und dass die Eigenfunktionen rekursiv gefunden werden können.

- (c) Wenn $n \neq 0$ ein Eigenwert des Operators $\hat{n}$ ist und $E_n(x)$ die zugehörige normierte Eigenfunktion, dann ist

$$E_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2n}} \hat{a} E_n(x)$$

eine normierte Eigenfunktion des Operators $\hat{n}$ zum Eigenwert $n-1$. Hieraus folgt erstens, dass nur ganze Zahlen Eigenwerte des Operators $\hat{n}$ sein können: Wenn ein Eigenwert n nicht ganzzahlig wäre, könnte man mit dieser Relation durch wiederholte Anwendung des Operators $\hat{a}$ eine Eigenfunktion zu einem negativen Eigenwert erzeugen. Es folgt auch, dass alle Eigenwerte $n=0, 1, 2, \dots$ nicht entartet sind: Wenn es zwei linear unabhängige Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert $n > 0$ gäbe, so kann man durch wiederholte Anwendung der oben genannten Relation zwei linear unabhängige Eigenfunktionen zum Eigenwert $n=0$ erzeugen, was ein Widerspruch zur Behauptung (a) ist.

Nun folgen die Beweise der einzelnen Schritte:

- (a) Sei n ein Eigenwert des Operators $\hat{n}$ und $E_n(x)$ die zugehörige normierte Eigenfunktion, dann

$$n = (E_n, \hat{n}E_n) = (E_n, \hat{a}^\dagger \hat{a}E_n) = (\hat{a}E_n, \hat{a}E_n) = \|\hat{a}E_n\|^2 \geq 0.$$

Gleichheit tritt nur dann auf, wenn $\hat{a}E_n = 0$. Explizit sieht die Gleichung $\hat{a}E_0 = 0$ so aus:

$$xE_0(x) = -\frac{dE_0(x)}{dx}.$$

Dies ist eine Differentialgleichung erster Ordnung. Aus der allgemeinen Theorie der Differentialgleichungen folgt, dass sie nur eine Lösung hat (bis auf Multiplikation mit einer komplexen Zahl). Diese Lösung ist

$$E_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}.$$

Sie ist normiert. Somit folgt die erste Behauptung.

- (b) Aus $[\hat{x}, \hat{k}] = i\hat{1}$ folgt, dass

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} \left([\hat{x}, \hat{x}] + i[\hat{k}, \hat{x}] - i[\hat{x}, \hat{k}] + [\hat{k}, \hat{k}] \right) = \hat{1}$$

und deshalb

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{n}, \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a}^\dagger.$$

Hieraus folgt, dass

$$\begin{aligned} \hat{n} \left(\frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger E_n \right) &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} (\hat{n} \hat{a}^\dagger E_n) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} (\hat{a}^\dagger \hat{n} + \hat{a}^\dagger) E_n \\ &= (n+1) \left(\frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger E_n \right). \end{aligned}$$

Normierung:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}} E_n, \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}} E_n \right) &= \frac{1}{n+1} (E_n, \hat{a} \hat{a}^\dagger E_n) \\ &= \frac{1}{n+1} (E_n, (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) E_n) \\ &= \frac{1}{n+1} (E_n, (\hat{n} + 1) E_n) \\ &= (E_n, E_n) \\ &= 1. \end{aligned}$$

(c) Der Kommutator

$$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = -\hat{a}.$$

Hieraus folgt, dass

$$\begin{aligned} \hat{n} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} E_n \right) &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{n} \hat{a} E_n \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a} \hat{n} - \hat{a}) E_n \\ &= (n-1) \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} E_n \right). \end{aligned}$$

Normierung:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} E_n, \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} E_n \right) = \frac{1}{n} (E_n, \hat{a}^\dagger \hat{a} E_n) = \frac{1}{n} (E_n, \hat{n} E_n) = 1.$$

7.5 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Kehren wir nun zum ursprünglichen Problem zurück, in dem x und p nicht dimensionslos sind. Dann geht aus dem Vorhergehenden hervor, dass die Operatoren

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{k}) = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} (\hat{x} + i x_0^2 \hat{k})$$

und

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{k}) = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} (\hat{x} - i x_0^2 \hat{k})$$

die Energie des Oszillators um einen Quant verringern bzw. vermehren,

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Aus diesem Grund werden diese Operatoren “Vernichtungs-” bzw. “Erzeugungsoperatoren” genannt.