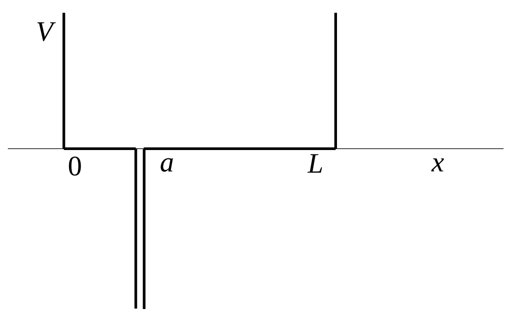
Skript zur 11. Vorlesung "Quantenmechanik", Montag den 23. Mai, 2011.

8 Doppelmulde

Um ein paar weitere interessante quantenmechanische Phenomäne zu erklären betrachten wir nun das Potential einer "Doppelmulde",

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \text{ oder } x > L \\ -v_0 \delta(x-a) & 0 < x < L \end{cases}$$

(Das Potential ist wie für ein Teilchen in einem Kasten der Größe L, aber mit einer (negativen) δ-Funktion Barriere.)



Die allgemeinen Lösungen für Energieeigenzustände zum Energie-Eigenwert $E = \hbar^2 k^2/2m$ sind

$$\begin{aligned} 0 < x < a: &\quad \psi(x) = A \sin kx \\ a < x < L: &\quad \psi(x) = B \sin k(x-L). \end{aligned}$$

Die Anschlussbedingungen bei $x = a$ sind:

$$A \sin ka = B \sin k(a-L), \quad Ak \cos ka = Bk \cos k(a-L) + \frac{2mv_0}{\hbar^2} A \sin ka.$$

Nichttriviale Lösungen für A und B bestehen nur, wenn

$$\begin{aligned} & \det \begin{pmatrix} \sin ka & \sin k(L-a) \\ k \cos ka - \frac{2mv_0}{\hbar^2} \sin ka & -k \cos k(L-a) \end{pmatrix} = 0 \\ \Leftrightarrow \quad & -\frac{2mv_0}{\hbar^2 k} \sin ka \sin k(L-a) + \sin kL = 0. \end{aligned}$$

In der letzten Zeile wurde die Identitaet $\sin\alpha\cos\beta + \sin\beta\cos\alpha = \sin(\alpha+\beta)$ verwendet. Wir betrachten zuerst die Grenzübergänge von v_0 klein und v_0 groß: Ist v_0 klein, so werden die Energieeigenwerte von der Gleichung $\sin kL = 0$ bestimmt. Dies ist dieselbe Gleichung wie für ein Teilchen im Kasten ohne δ-Funktion Barriere. Ist v_0 dagegen groß, so sind die Energieeigenwerte von den Gleichungen $\sin ka = 0$ und $\sin k(L-a) = 0$ bestimmt: Wie für zwei Kästen der Breite a und $L - a$. Wir wollen diesen zweiten Grenzfall nun näher betrachten.

Aus der Gleichung

$$\frac{A}{B} = -\frac{\sin k(L-a)}{\sin ka}$$

schließt man: Wenn der Energieeigenwert aus der Gleichung $\sin ka = 0$ fefunden wird, so verschwindet B. Das Teilchen befindet sich dann im Bereich $0 < x < a$, also auf der linken Seite der Barriere. Wenn der Energieeigenwert aus der Gleichung $\sin k(L-a) = 0$ gefunden wird, so verschwindet A. Dann befindet sich das Teilchen im Bereich $a < x < L$, auf der rechten Seite.

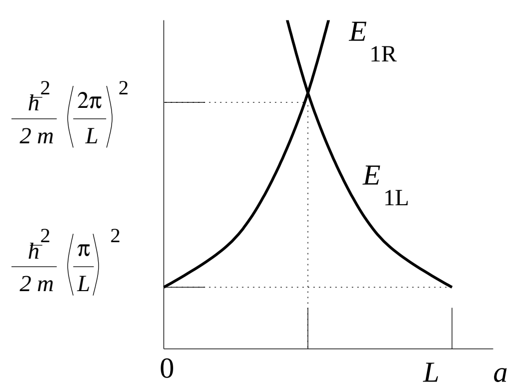
Ein sehr interessanter Fall tritt auf, wenn a so gewählt wird, dass beide Gleichungen $\sin ka = 0$ und $\sin k(L-a) = 0$ zur gleichen Zeit erfüllt sind. Um diese Situation zu untersuchen, beschränken wir uns auf den niedrigster Energie-Eigenwert mit dem Teilchen im Bereich $0 < x < a$,

$$E_{1\mathrm{L}}(a) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$

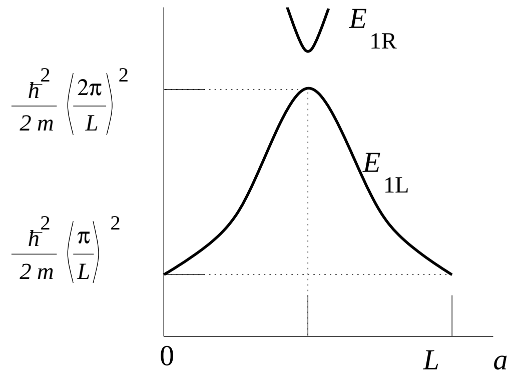
und auf den niedrigsten Energie-Eigenwert mit dem Teilchen im Bereich $a < x < L$,

$$E_{1\mathrm{R}}(a) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L-a}\right)^2.$$

Im Limes $v_0 \to \infty$ sieht die a-Abhängigkeit dieser beiden Energie-Eigenwerte so aus:



Wenn das δ-Potential v_0 groß, aber nicht $\to \infty$: Dann wird die Entartung von $E_{1\mathrm{R}}$ und $E_{1\mathrm{L}}$ bei $a = \frac{L}{2}$ wird aufgehoben. Schematisch sieht dies so aus:



Für $a = L/2$ sind die Zustände nicht mehr in einem der beiden Teilbereiche lokalisiert, sondern sie sind symmetrische oder antisymmetrische Linearkombinationen der lokalisierten Zustände. Man kann dies so begründen:

1. Durch explizite Berechnung der Koeffizienten A und B für $a = \frac{L}{2}$. (gerade unter $x \to L - x$: $A = -B$, ungerade unter $x \to L - x$: $A = B$)

2. Für $a = L/2$ ist der Hamilton-Operator spiegelsymmetrisch um $x = a$. $\Rightarrow$ Eigenzustände sind gerade/ungerade unter $x \to L - x$.

   Die ungeraden Zustände haben $\psi(x) = 0$ für $x = a$. $\Rightarrow$ Sie werden nicht vom δ-Potential beeinflusst und haben die gleiche Energie wie im Fall $v_0 = 0$.

   Die geraden Zustände haben $\psi(x) \neq 0$ für $x = a$. Ihre Energie ist geändert im Vergleich zum Fall $v_0 = 0$

Wir wollen nun die beiden Energie-Eigenwerte E_1 genauer ausrechnen in der Nähe vom Entartungspunkt $a = L/2$ und die Koeffizienten A, B der Eigenzustände bestimmen, im Fall dass die Transparenz der Potentialbarriere <u>klein</u> ist (d.h. dass v_0 groß ist). Hierzu schreiben wir die Ansschlussbedingungen als (wir multiplizieren die zweite Zeile des Gleichungssystems mit $-\hbar^2/2mv_0$):

$$\begin{pmatrix} \sin ka & \sin k(L-a) \\ \sin ka - \frac{\hbar^2 k}{2mv_0} \cos ka & \frac{\hbar^2 k}{2mv_0} \cos k(L-a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Für eine δ-Barriere fanden wir für die Transmissionsamplitude $t(k)$:

$$t(k) = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k - imv_0},$$

so dass, für v_0 gross,

$$t(k) \to i\frac{\hbar^2 k}{m v_0} \equiv i\tau(k).$$

Die Anschlussbedingungen werden nun:

$$\begin{pmatrix} \sin ka & \sin k(L-a) \\ \sin ka - \frac{\tau(k)}{2}\cos ka & \frac{\tau(k)}{2}\cos k(L-a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Wir entwickeln um den Entartungspunkt, $E = E_0 + \delta E$, wobei

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

der Energie-Eigenwert am Entartungspunkt $a = L/2$ im Limes $v_0 \to \infty$ ist. Wir benützen

$$\begin{aligned} k &= \frac{2\pi}{L} + \frac{dk}{dE}\delta E \\ &= \frac{2\pi}{L} + \frac{\delta E}{\hbar v} \end{aligned}$$

wobei

$$v = \left.\frac{dE}{\hbar dk}\right|_{k=\frac{2\pi}{L}} = \frac{2\pi\hbar}{mL}$$

die Geschwindigkeit ist, und schreiben

$$a = \frac{L}{2} + \delta a.$$

Für die Anschlussbedingungen findet man dann, zu erster Ordnung in δE, δa und $\tau \equiv \tau(k = \frac{2\pi}{L})$:

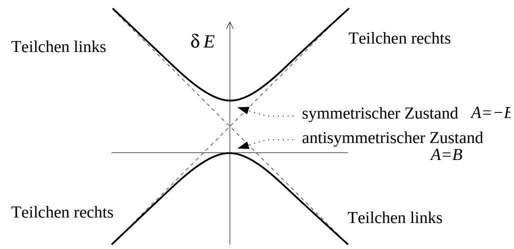
$$\begin{pmatrix} -\frac{2\pi\delta a}{L} - \frac{L\delta E}{2\hbar v} & \frac{2\pi\delta a}{L} - \frac{L\delta E}{2\hbar v} \\ \frac{\tau}{2} - \frac{2\pi\delta a}{L} - \frac{L\delta E}{2\hbar v} & \frac{\tau}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Diese Gleichung kann nun in der Form einer Energie-Eigenwert-Gleichung geschrieben werden, in der die Matrix ein "effektiver Hamilton-Operator" wird. In diesem Schritt subtrahieren wir zunaechst die zweite Zeile von der ersten und vertauschen dann die beiden Zeilen. Ausserdem multiplizieren wir mit $\frac{2\hbar v}{L}$:

$$\begin{pmatrix} -\frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} + \frac{\hbar\tau v}{L} & -\frac{\hbar\tau v}{L} \\ -\frac{\hbar\tau v}{L} & \frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} + \frac{\hbar\tau v}{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \delta E \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Die Energie-Eigenwerte sind nun:

$$\delta E_{\pm} = \frac{\hbar\tau v}{L} \pm \sqrt{\left(\frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2}\right)^2 + \left(\frac{\hbar\tau v}{L}\right)^2}.$$



Man betrachtet

$$\widetilde{H} = \begin{pmatrix} -\frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} + \frac{\hbar\tau v}{L} & -\frac{\hbar\tau v}{L} \\ -\frac{\hbar\tau v}{L} & \frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} + \frac{\hbar\tau v}{L} \end{pmatrix}$$

als Hamilton-Operator in einem zweidimensionalen Hilbertraum, in dem nur Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$, mit Teilchen links/rechts der Barriere, berücksichtigt werden. Der effektive Hamilton-Operator $\widetilde{H}$ stellt sich dann aus drei Beiträgen zusammen:

1. Energie der Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$ mit undurchlässiger Barriere

$$\begin{aligned} \delta E_L &= -\frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\right], \\ \delta E_R &= \frac{4\pi\hbar v\delta a}{L^2} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{L-a}\right)^2 - \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\right]. \end{aligned}$$

2. Energieverschiebung der Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$ durch "Tunneln" durch die Potentialbarriere

$$\delta E_L = \delta E_R = +\frac{\hbar\tau v}{L}$$

3. Kopplung der Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$ durch die Potentialbarriere. Die Kopplung führt dazu, dass die Entartung bei $a = \frac{L}{2}$ aufgehoben wird.

Auch wenn das Problem der Doppelmulde, in der Form wie es hier behandelt wird, sehr akademisch ist, gelten die qualitativen Beobachtungen allgemein:

- Eine Kopplung zwischen entarteten quantenmechanischen Zuständen hebt die Entartung auf, auch wenn diese Kopplung nur schwach ist.
- Die Energie-Eigenwerte und die stationären Zuständen können in der Nähe des Entartungspunktes durch das Diagonalisieren einer d-dimensionalen Matrix gefunden werden, wobei d die Zahl der entarteten Zuständen ist.