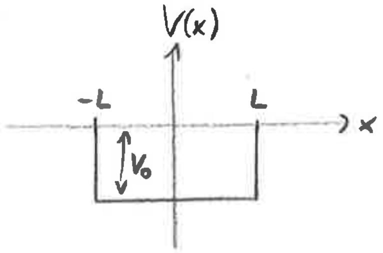
2. 1D-Probleme

→ wollen zeitunabhängige Schrödinger-Glg. in einer Dimension (1D) näher untersuchen;
dazu die Potentiale:  ≈ "Physik" ?

2.1 Teilchen im Potentialtopf



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

Potential: $V(x) \equiv -V_0\,\Theta(L^2-x^2) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x|\le L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

- klassische Mechanik: alle Energien $E > -V_0$ erlaubt
  falls $E<0$, muss das Teilchen in $|x|<L$ sein!

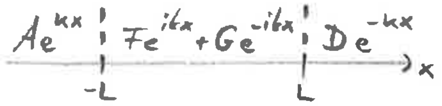
- hier: Lösungen $\psi_E(x)$ der S.G. berechnen!
  → Normierung $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi_E(x)|^2 = 1$
  → Annahme, dass $\boxed{E\le 0}$ (($E>0$: siehe § 2.3))
  bezeichne $E \equiv -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$, mit $\kappa > 0$
  → Strategie: bestimme Lsn in den drei Gebieten 
  setze diese mit bestimmten Anschlussbedingungen zusammen

① $\psi_E''(x) = \kappa^2\psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$
normierbar für $\psi_E(x\to-\infty)=0 \Rightarrow B \overset{!}{=} 0$

③ $\psi_E''(x) = \kappa^2\psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$
normierbar für $\psi_E(x\to+\infty)=0 \Rightarrow C \overset{!}{=} 0$

② $\psi_E''(x) = -\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)}_{\equiv k^2}\psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$
normierbar ✓✓

ist positiv für $\boxed{E>-V_0}$

also: 

Anschlussbedingungen bei $x = \pm L$?

- $\psi_E(x)$ muss stetig sein!

  ((denn wenn nicht, also $\psi_E(x) = \varphi(x) + c\,\Theta(x-x_0)$,

  $\Rightarrow \psi_E'(x) = \varphi'(x) + c\,\delta(x-x_0)$, $\psi_E''(x) = \varphi''(x) + c\,\delta'(x-x_0)$,

  aber $V(x)$ hat kein δ'))

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

  ((denn wenn nicht, also $\psi_E'(x) = \varphi(x) + c\,\Theta(x-x_0)$,

  $\Rightarrow \psi_E''(x) = \varphi'(x) + c\,\delta(x-x_0)$, aber $V(x)$ hat kein δ))

$\Rightarrow$ haben also vier Bedingungen:

$$\psi_E(-L^-) \overset{!}{=} \psi_E(-L^+) \quad \Leftrightarrow \quad A e^{-\kappa L} \overset{!}{=} F e^{-ikL} + G e^{ikL}$$

$$\psi_E(L^+) \overset{!}{=} \psi_E(L^-) \quad \Leftrightarrow \quad D e^{-\kappa L} \overset{!}{=} F e^{ikL} + G e^{-ikL}$$

$$\psi_E'(-L^-) \overset{!}{=} \psi_E'(-L^+) \quad \Leftrightarrow \quad \kappa A e^{-\kappa L} \overset{!}{=} ik\left(F e^{-ikL} - G e^{ikL}\right)$$

$$\psi_E'(L^+) \overset{!}{=} \psi_E'(L^-) \quad \Leftrightarrow \quad -\kappa D e^{-\kappa L} \overset{!}{=} ik\left(F e^{ikL} - G e^{-ikL}\right)$$

$\rightarrow$ 4 Gln. für 4 Var lösen ...

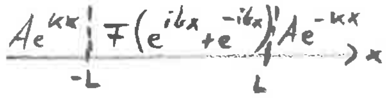
Vereinfachung: da das Potential eine Symmetrie hat, $V(-x) = V(x)$, ist mit $\psi_E(x)$ auch $\psi_E(-x)$ Lösung zur gleichen Energie.

$$\left(\left(\text{denn: } S.G.\big|_{x\to -x} : \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial^2_{(-x)} + V(-x)\right]}_{\overset{!}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)} \psi_E(-x) = E\,\psi_E(-x)\right)\right)$$

$\Rightarrow$ können Lsn $\psi_E(x) + \psi_E(-x)$ (symm.) wählen.

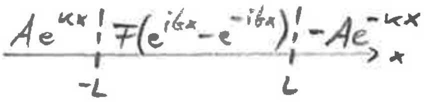
$\psi_E(x) - \psi_E(-x)$ (antisymm.)

$\rightarrow$ symm. Lsn: $A = D$, $F = G$



Anschluss:
$$\left.\begin{aligned} A e^{-\kappa L} &= 2F\cos(kL) \\ \kappa A e^{-\kappa L} &= 2kF\sin(kL) \end{aligned}\right\} \quad \kappa \overset{!}{=} k\tan(kL) \quad (*)$$

$\rightarrow$ antisymm. Lsn: $A = -D$, $F = -G$



Anschluss:
$$\left.\begin{aligned} A e^{-\kappa L} &= -2iF\sin(kL) \\ \kappa A e^{-\kappa L} &= 2ikF\cos(kL) \end{aligned}\right\} \quad \kappa \overset{!}{=} -k\cot(kL) \quad (*)$$

Erinnerung (an S. 17): κ, k waren lediglich Abkürzungen v. E,

$$\left(\left(E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \quad , \quad E+V_0 = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \right)\right)$$

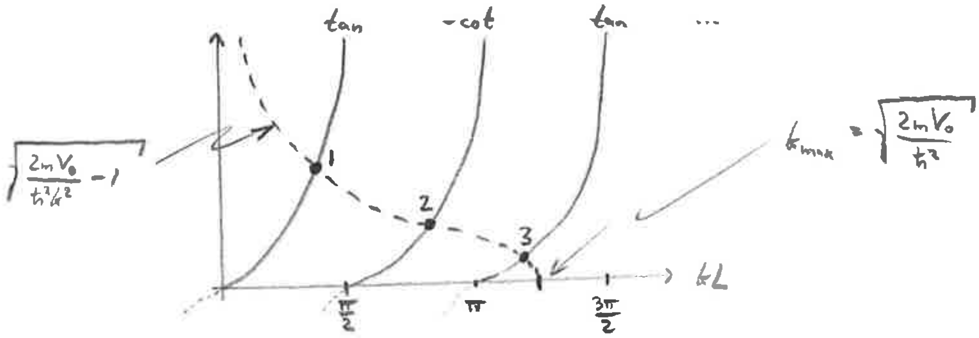
also sind die oben erhaltenen Bedingungen(*) (transzendentale) Gln. für E.

→ Lösen?! schwierig – aber numerisch / graphisch möglich!

$$\text{Es ist} \quad \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{-2mE/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0/\hbar^2 - 2m(E+V_0)/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2k^2}-1} \ ,$$

$$\text{so dass}(*) \quad \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2k^2}-1} = \begin{cases} \tan(kL) & (\text{symm.}) \\ -\cot(kL) & (\text{antisymm.}) \end{cases}$$

zu lösen ist (und dann $k \to E$), z.B. graphisch:

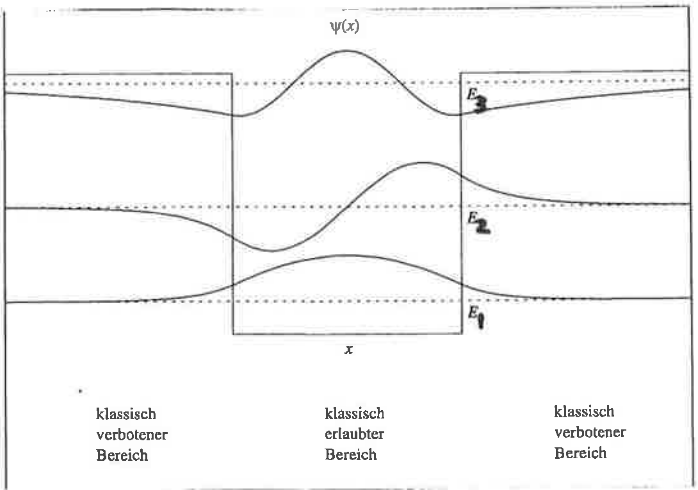


⇒ Energiespektrum ist <u>diskret</u>!

- es gibt eine endliche Anzahl n von Lsn.

  n hängt von V_0, L ab: $(n-1)\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\, L < n\frac{\pi}{2}$
- es gibt mindestens eine Lösung (1), mit symmetrischer Wellenfunktion
- in den Bereichen ①, ③ (also für $|x|>L$) verschwindet die Wellenfkt. <u>nicht</u> (ist aber exponentiell klein)
- die Wellenfkt. des <u>Grundzustandes</u> $\psi_{E_1}(x) = 2F\cos(k_1x)$ $(|x|<L)$ hat keine Nullstellen (Knoten), weil $k_1L < \frac{\pi}{2}$

  ((allg.: $\psi_{E_n}(x)$ hat n-1 Knoten))



[aus: G. Münster, Quantentheorie, § 3.2.1]