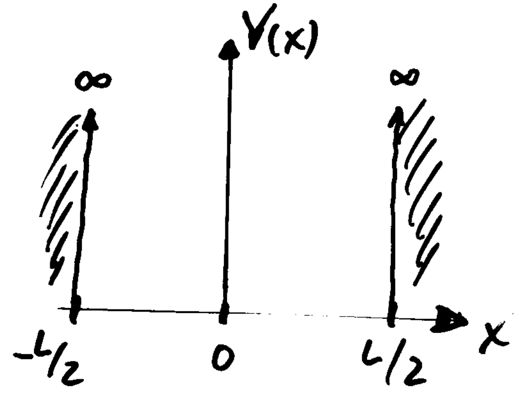
3. Einfache Probleme in 1 Dimension

1. Beispiel: unendlich hoher Potentialtopf

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad \text{mit } V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le L/2 \\ \infty, & |x| > L/2 \end{cases}$$

- stückweis konstantes Potential
- Randbedingungen / Anschlußbedingungen

hier: $\psi(x = \pm L/2) \overset{!}{=} 0$



Lösung:

$|x| \le L/2$: $\psi(x) \sim e^{ikx} \pm e^{-ikx}$ sonst: $\psi(x) \equiv 0$

→ 2 Lösungsfamilien:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\cos kx & \xrightarrow{\text{Randbdg.}} k \to k_n = \frac{(2n+1)}{L}\pi \quad n = 0, 1, \ldots \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx & \longrightarrow k \to k_n = \frac{2n}{L}\pi \quad n = 1, 2 \ldots \end{cases}$$

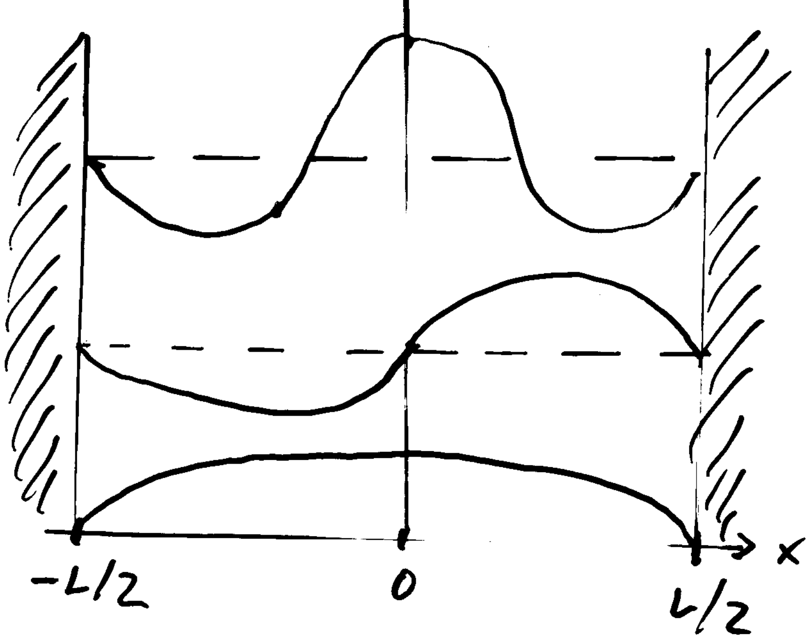
②

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi}{L}\right)^2 \qquad \psi_2 = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{3\pi}{L}x\right)$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \qquad \psi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \qquad \psi_0 = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$



Erkenntnisse:

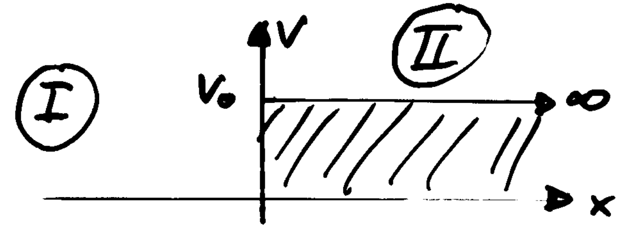
1.) Randbedingungen im Ort "quanteln" Impuls (→ Energie)
→ gebundene Zustände haben diskretes Spektrum

2.) Anzahl der Knoten in Wellenfunktion steigt um 1 wenn Hauptquantenzahl $n \to n+1$

3.) Zustände besitzen alternierende Parität

2. Beispiel: Potentialstufe

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad \text{mit } V(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0 \\ V_0 > 0, & x \ge 0 \end{cases}$$



Bereich I:

1.) Einfallende Welle: $\psi_I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$

2.) Reflektierte Welle: $\psi_R = r \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Bereich II:

3.) Transmittierte Welle: $\psi_T = t\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_T x}$

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

$$k_T = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \qquad E > V_0$$

$$k_T = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} =: i\kappa \qquad E < V_0$$

$\underline{E > V_0}$: $\psi_T = \frac{t}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_T x}$

$\underline{E < V_0}$: $\psi_T = \frac{t}{\sqrt{2\pi}} e^{-\kappa x}$

<u>Anschluß bedingungen</u> <u>bei $x=0$</u> (endlich ! Potentialstufe) ④

Stetigkeit der W.F. : $\psi_I(0) + \psi_R(0) = \psi_T(0) \Rightarrow 1 + r = t$

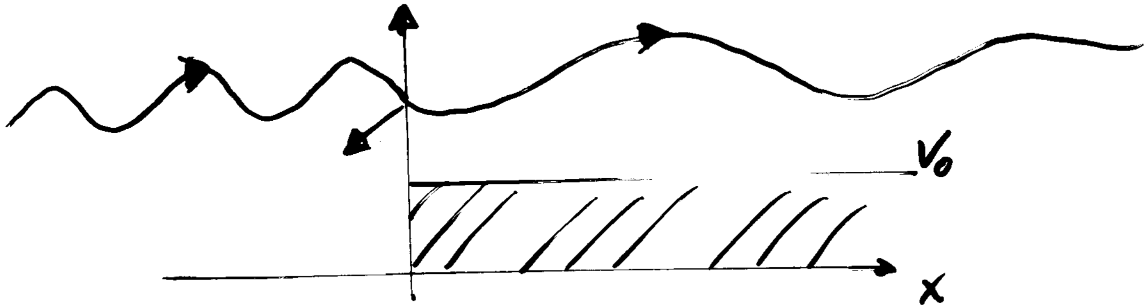
Stetigkeit der Ableitung : $\psi_I'(0) + \psi_R'(0) = \psi_T'(0) \Rightarrow ik(1-r) = ik_T t$

Reflektions amplitude : $r = \dfrac{k - k_T}{k + k_T}$

Transmissions amplitude : $t = 1 + r = \dfrac{2k}{k + k_T}$

<u>Fall 1:</u> $E > V_0$

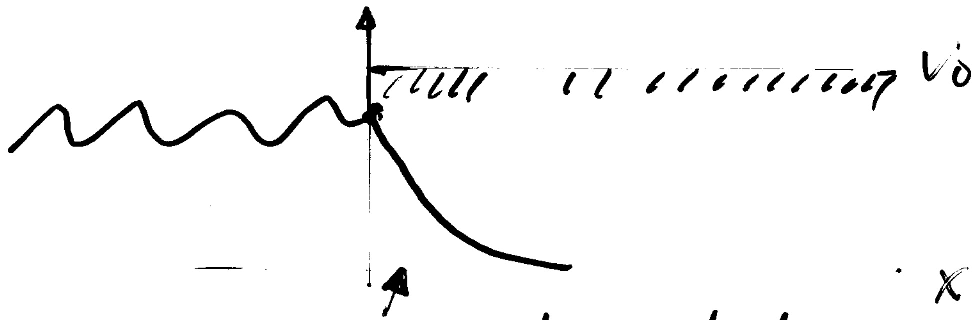
$k_T < k$



<u>Fall 2:</u> $E < V_0$

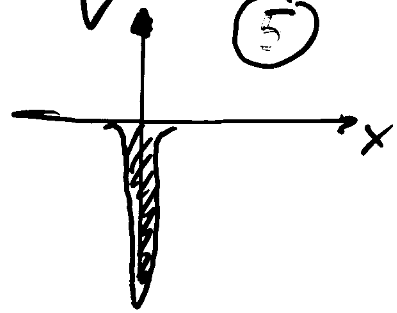
$k_T = i\kappa$

$|r|^2 = \dfrac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \dfrac{k + i\kappa}{k - i\kappa} = 1$



klassisch verboten

3. Beispiel: δ - Potential



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad \text{mit} \quad V(x) = -V_0\,\delta(x)$$

Bereich $x<0$:

$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{ikx} \qquad \text{und} \qquad \psi_R(x) = \frac{r}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Bereich $x>0$:

$$\psi_T(x) = \frac{t}{\sqrt{2\pi}}\,e^{ikx}$$

bei $x=0$:

$$\psi_I(0) + \psi_R(0) = \psi_T(0) \quad \checkmark$$

Ableitung?

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi''(x)\right] = V_0\,\delta(x)\,\psi(x) + E\,\psi(x) \qquad \Big|\ \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)\right] = V_0\,\psi(0) + E\,\underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\,\psi(x)}_{\to 0}$$

$\rightarrow$ Ableitung springt! $\qquad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\,\psi(0)$

6

1.) $\underline{E>0}$

$\underline{x<0}$: $\psi_I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ und $\psi_R = \frac{r}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}$ $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\underline{x>0}$: $\psi_T = \frac{t}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$

$\underline{x=0}$: $\psi_I(0) + \psi_R(0) = \psi_T(0) \Rightarrow 1 + r = t$ (1)

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \left[t\,ik - ik + r\,ik\right] 1/\sqrt{2\pi}$$

$$\stackrel{!}{=} -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} t/\sqrt{2\pi}$$

$$\Rightarrow ik(1-r) = i\left(k - i\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)t$$ (2)

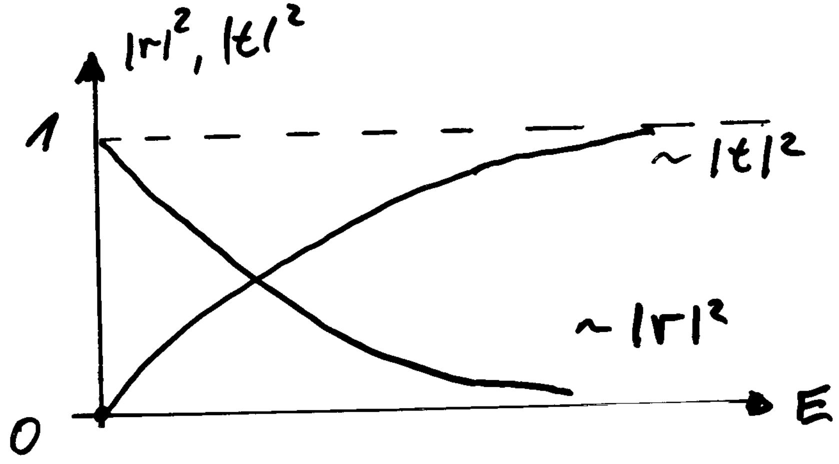
$$r = \frac{-1}{1 + i\frac{\hbar^2 k}{mV_0}}$$ und $$t = 1 + r = \frac{i\frac{\hbar k}{mV_0}}{1 + i\frac{\hbar^2 k}{mV_0}}$$

$r, t \in \mathbb{C}$ mit $|r|^2 + |t|^2 = \underline{1}$

7

$$|r|^2 = \frac{1}{1+\left(\frac{\hbar^2}{mV_0}\right)^2 k^2} \qquad |t|^2 = \frac{\left(\frac{\hbar^2}{mV_0}\right)^2 k^2}{1+\left(\frac{\hbar^2}{mV_0}\right)^2 k^2}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



- Phasenverschiebung der reflektierten Welle:

Amplitude:

$$r = |r| \, e^{i\delta_R(E)}$$

$$\tan \delta_R(E) = \frac{\mathrm{Im}(r)}{\mathrm{Re}(r)} = -\frac{\hbar^2 k}{mV_0} < 0$$

$$\delta_R(E) = \arctan\left(-\frac{\hbar^2 k}{mV_0}\right)$$

2.) $\underline{E<0}$ Gibt es gebundene Zustände?

Annahme: es gibt sie $\sim e^{\pm i q x}$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi(0)\, e^{-\kappa x} & x>0 \\ \psi(0)\, e^{\kappa x} & x<0 \end{cases}$$

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = i\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} =: i\kappa$$

•) Stetigkeit von $\psi(x)$ für $x=0$

•) Sprung der Ableitung

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \psi(0)\left[-\kappa - +\kappa\right] = -2\kappa\,\psi(0) \overset{!}{=} -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)$$

<u>Bedingung:</u> $\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2} > 0$ ✓ Es gibt <u>einen</u> gebundenen Zustand!

<u>Energie:</u> $\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2m(-E)}{\hbar^2}\right) \overset{!}{=} \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\right)^2$

$$\boxed{E = -\frac{m}{2}\left(\frac{V_0}{\hbar}\right)^2}$$

<u>Hinweis:</u> $q = i\kappa = imV_0/\hbar^2$
ist Pol von τ

Zusammenfassung für 1dim Potentialprobleme

1.) • Energien von gebundenen Zuständen sind quantisiert
d.h. Spektren sind diskret
• propagierende Zustände haben kontinuierliches Spektrum

2.) Knotensatz:
Anzahl der Knoten steigt mit steigender Energiequantenzahl

3.) Es gibt keine Energieentartung in 1D

Beweis durch Widerspruch:

① $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_1 + V\psi_1 = E\psi_1 \quad | \cdot \psi_2$ ② $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_2 + V\psi_2 = E\psi_2 \quad | \cdot \psi_1$

① - ② $\psi_1\partial_x^2\psi_2 - \psi_2\partial_x^2\psi_1 = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x}\big[\underbrace{\psi_1\partial_x\psi_2 - \psi_2\partial_x\psi_1}_{=0 \text{ da } x \xrightarrow{\psi \to 0} \infty}\big] = 0$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_2}{\psi_2} = \frac{d\psi_1}{\psi_1} \Rightarrow \ln\psi_2 = \ln\psi_1 + d$$

$$\psi_2 = e^d\psi_1 \quad \square$$