4. Quantensysteme in einer Dimension

4.1. Allgemeine Eigenschaften

Stationäre Schrödinger-Gleichung in einer Dimension:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Annahmen (Potential):

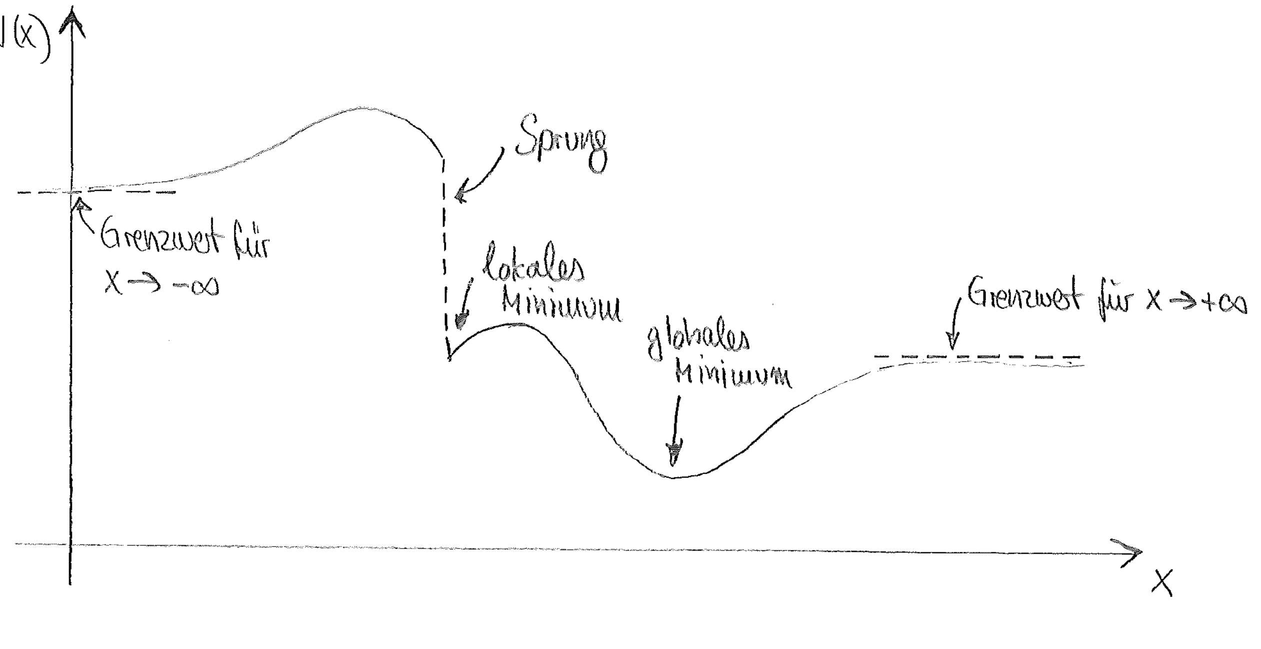
(1) $V(x)$ ist nach unten beschränkt: $V_0 = \min_{x\in\mathbb{R}} V(x) \in \mathbb{R}$

(2) $V(x)$ ist stückweise stetig

(3) $\lim_{x\to\pm\infty} V(x)$ existiert als reelle Zahl oder $+\infty$. (Dies schließt oszillierende Potentiale der Form $V(x) \propto \cos(kx)$ aus.)

Beispiel:

11.11.19



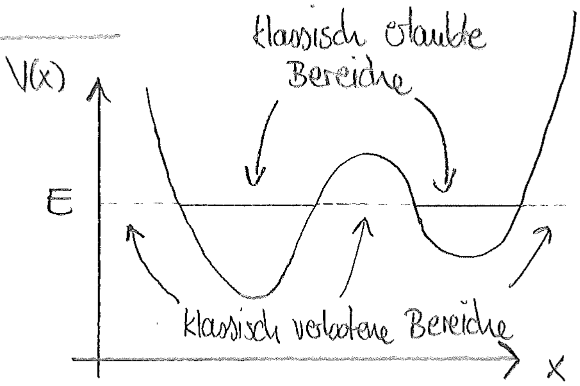
Bemerkung:

Falls $\psi(x)$ beschränkt $\overset{(2)}{\Rightarrow}$ $\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\psi(x)$ stückweise stetig.

$$\Rightarrow \psi'(x) \begin{cases} \text{stetig, falls } V(x) \text{ nur endliche Sprünge hat} \\ \text{stückweise stetig, falls } V(x) \text{ unendliche Sprünge hat} \end{cases}$$

$\Rightarrow \psi(x)$ stetig

4.1.1. Klassisch verbotene und erlaubte Bereiche



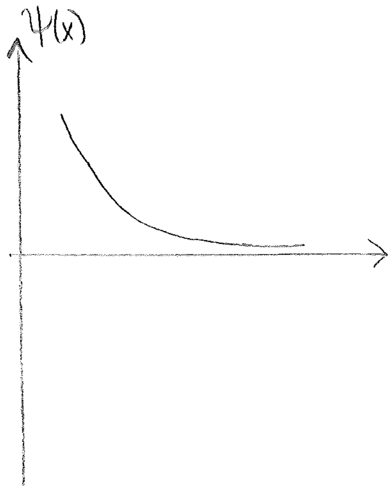
Klassische Mechanik:

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\geq 0} + V(x) \geq V(x)$$

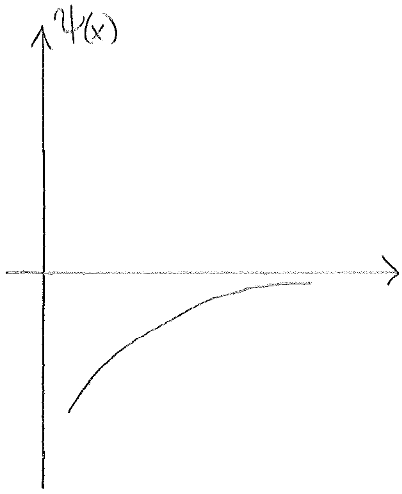
Quantenmechanik:

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x)) \begin{cases} <0 & \text{in klassisch erlaubten Bereichen} \\ >0 & \text{in klassisch verbotenen Bereichen} \end{cases}$$

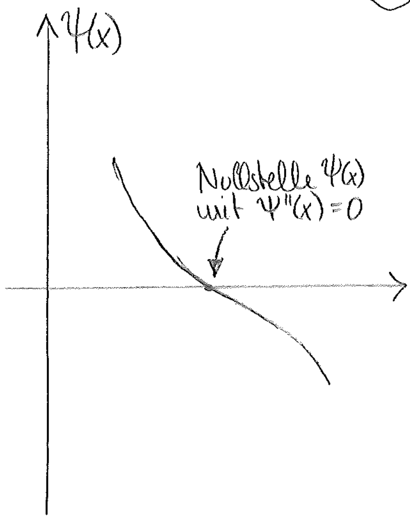
Klassisch verbotene Bereiche $E < V(x)$:



oder

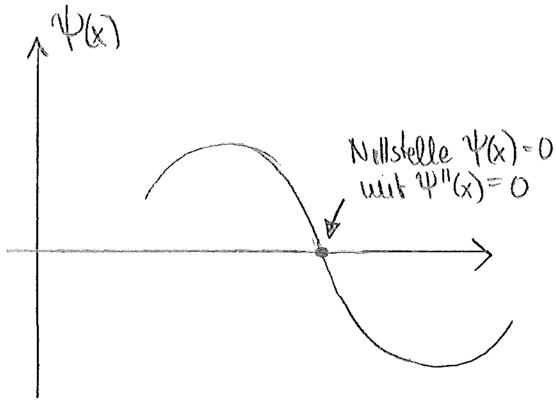


oder



$\Rightarrow$ $\psi(x)$ ist von der x-Achse weg gekrümmt.

Klassisch erlaubte Bereiche $E > V(x)$:



$\Rightarrow$ $\psi(x)$ ist zur x-Achse hin gekrümmt.

4.1.2. Energiespektrum

I) Energiebereich $E < V_0 = \min_{x \in \mathbb{R}} V(x)$:

Es existieren keine beschränkten Lösungen $\psi(x)$.

Beispiel: $V(x) = V_0 = 0$, $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x)$ mit $E<0$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \underbrace{\exp\left[\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right]}_{\to \infty \text{ für } x \to \infty} + B \underbrace{\exp\left[-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right]}_{\to \infty \text{ für } x \to -\infty} \text{ unbeschränkt}$$

II) Energiebereich $V_0 \leq E < \lim_{x \to \pm\infty} V(x)$:

Alle beschränkten Lösungen $\psi(x)$ sind normierbar mit $\lim_{x \to \pm\infty} \psi(x) = 0$.

Es existiert nur für bestimmte Energien E_n beschränkte Lösungen ("diskretes Spektrum").

Interpretation: Lösungen $\psi_n(x)$ beschreiben gebundene Zustände.

III) Energiebereich $\min\left[\lim_{x \to \pm\infty} V(x)\right] \leq E \leq \max\left[\lim_{x \to \pm\infty} V(x)\right]$
(falls $\lim_{x \to -\infty} V(x) \neq \lim_{x \to +\infty} V(x)$) :

Es existiert zu jeder Energie E genau eine Lösung $\psi(x)$
("einfach entartetes kontinuierliches Spektrum").

Interpretation: Lösungen $\psi(x)$ beschreiben vollständig reflektierende Streuzustände.

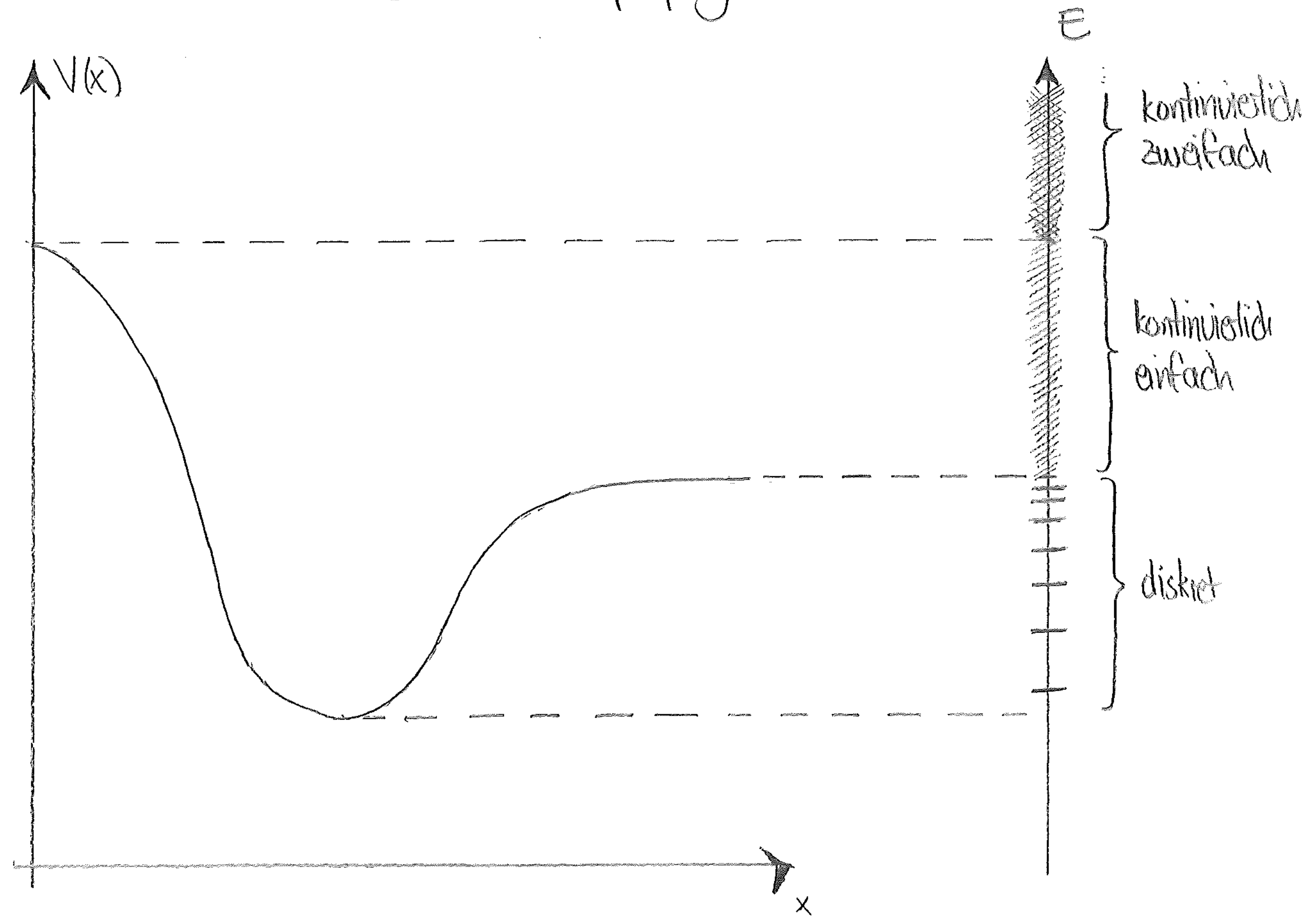
IV) Energiebereich $E > \max[\lim_{x \to \pm\infty} V(x)]$ (falls $\max \lim_{x\to\pm\infty} V(x) < \infty$):

Es existieren zu jeder Energie zwei linear unabhängige Lösungen $\psi_\pm(x)$.
("zweifach entartetes kontinuierliches Spektrum").

Interpretation: Lösungen $\psi_\pm(x)$ beschreiben nach rechts bzw. nach links laufende Streuzustände.

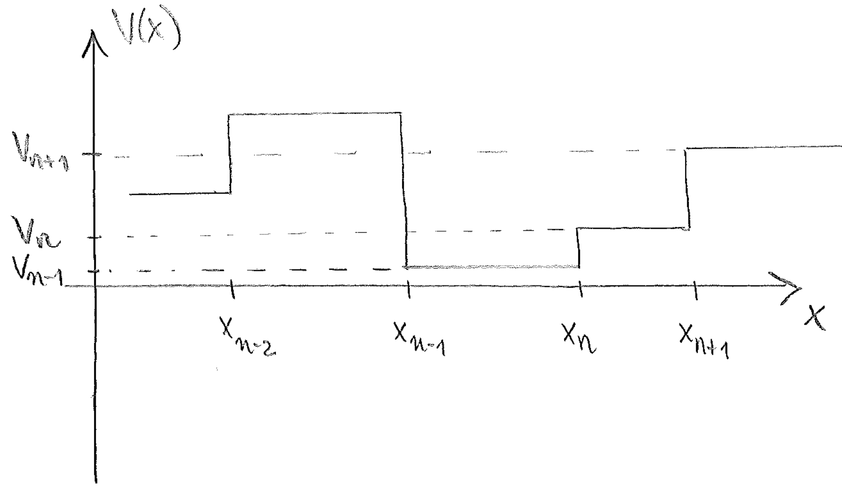
Bemerkung:

Das kontinuierliche Spektrum ist unter den Annahmen (1)-(3) lückenlos. Dies gilt nicht mehr, wenn z.B. V(x) periodisch ist: Dann kann es Energien im Bereich (III) oder (IV) geben, für die keine Lösung existiert ("Bandlücken").
Wichtiges Beispiel: Elektronen im periodischen Potential der Atomkerne (Festkörperphysik).



4.2. Rechteckpotentiale

Rechteckpotentiale : Potentiale, die bis auf Sprünge konstant sind



Strategie:

(a) Lösung der Schrödingergleichung innerhalb der einzelnen Bereiche $x \in (x_n, x_{n+1})$

(b) Konstruktion der Gesamtlösung unter Ausnutzung der Anschlussbedingungen: $\psi(x \nearrow x_n) \overset{!}{=} \psi(x \searrow x_n)$ und $\psi'(x \nearrow x_n) \overset{!}{=} \psi'(x \searrow x_n)$

(a) Schrödinger-Gleichung für $x \in (x_n, x_{n+1})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E - V_n)\psi(x)$$

Lösung:

$$\psi(x) = A_{n,+}\, e^{ik_n x} + A_{n,-}\, e^{-ik_n x}$$

mit

$$k_n = \begin{cases} \sqrt{2m(E-V_n)}/\hbar & \text{für } E \geq V_n \quad \text{(klassisch erlaubt)} \\ i\sqrt{2m(V_n - E)}/\hbar & \text{für } E < V_n \quad \text{(klassisch verboten)} \end{cases}$$

Analog für $x \in (x_{n-1}, x_n)$:

$$\psi(x) = A_{n-1,+} e^{ik_{n-1}x} + A_{n-1,-} e^{-ik_{n-1}x}$$

(b) Anschlussbedingungen bei $x = x_n$:

$\psi(x)$ stetig: $\quad A_{n-1,+} e^{ik_{n-1}x_n} + A_{n-1,-} e^{-ik_{n-1}x_n} = A_{n,+} e^{ik_n x_n} + A_{n,-} e^{-ik_n x_n}$

$\psi'(x)$ stetig: $\quad ik_{n-1} A_{n-1,+} e^{ik_{n-1}x_n} - ik_{n-1} A_{n-1,-} e^{-ik_{n-1}x_n} = ik_n A_{n,+} e^{ik_n x_n} - ik_n A_{n,-} e^{-ik_n x_n}$

18.11.19

Matrix-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} e^{ik_{n-1}x_n} & e^{-ik_{n-1}x_n} \\ ik_{n-1} e^{ik_{n-1}x_n} & -ik_{n-1} e^{-ik_{n-1}x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1,+} \\ A_{n-1,-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_n x_n} & e^{-ik_n x_n} \\ ik_n e^{ik_n x_n} & -ik_n e^{-ik_n x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n,+} \\ A_{n,-} \end{pmatrix}$$

Matrix-Inversion:

$$\begin{pmatrix} A_{n,+} \\ A_{n,-} \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} A_{n-1,+} \\ A_{n-1,-} \end{pmatrix}$$

mit "Transfermatrix" M_n:

$$M_n = \begin{pmatrix} e^{ik_n x_n} & e^{-ik_n x_n} \\ ik_n e^{ik_n x_n} & -ik_n e^{-ik_n x_n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ik_{n-1} x_n} & e^{-ik_{n-1} x_n} \\ ik_{n-1} e^{ik_{n-1} x_n} & -ik_{n-1} e^{-ik_{n-1} x_n} \end{pmatrix}$$

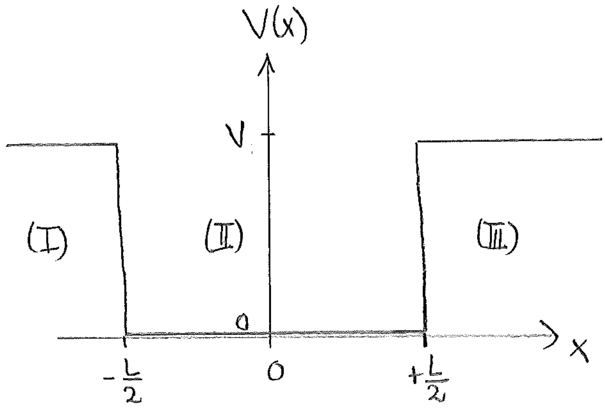
$$= \begin{pmatrix} \frac{k_n + k_{n-1}}{2k_n} e^{-i(k_n - k_{n-1})x_n} & \frac{k_n - k_{n-1}}{2k_n} e^{-i(k_n + k_{n-1})x_n} \\ \frac{k_n - k_{n-1}}{2k_n} e^{i(k_n + k_{n-1})x_n} & \frac{k_n + k_{n-1}}{2k_n} e^{i(k_n - k_{n-1})x_n} \end{pmatrix}$$

Lösung beliebiger Rechteckpotentiale durch wiederholtes Anwenden der Transfermatrix.

4.2.1. Kastenpotential

Potential (endlicher Kasten):

$$V(x) = \begin{cases} V & \text{für } |x| > \frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } |x| < \frac{L}{2} \end{cases}$$



Allgemeine Lösung:

(I) $x \in (-\infty, -\frac{L}{2})$: $\psi_I(x) = A_{I+} e^{ik_I x} + A_{I-} e^{-ik_I x}$

(II) $x \in (-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2})$: $\psi_{II}(x) = A_{II+} e^{ik_{II} x} + A_{II-} e^{-ik_{II} x}$

(III) $x \in (+\frac{L}{2}, +\infty)$: $\psi_{III}(x) = A_{III+} e^{ik_{III} x} + A_{III-} e^{-ik_{III} x}$

Diskretes Spektrum:

$$0 < E < V \quad \Rightarrow \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \equiv k \quad , \quad k_I = k_{III} = i\,\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \equiv i\kappa$$

Lösung:

$$\text{(I)} \qquad \psi_I(x) = A_{I+}\, e^{-\kappa x} + A_{I-}\, e^{+\kappa x}$$

$$\text{(II)} \qquad \psi_{II}(x) = A_{II+}\, e^{ikx} + A_{II-}\, e^{-ikx}$$

$$\text{(III)} \qquad \psi_{III}(x) = A_{III+}\, e^{-\kappa x} + A_{III-}\, e^{+\kappa x}$$

Beschränktheit: $\quad A_{I+} = A_{III-} = 0$

Anschlussbedingungen:

$$\begin{pmatrix} A_{III+} \\ 0 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} M(x=+\tfrac{L}{2}) \begin{pmatrix} A_{II+} \\ A_{II-} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} M(x=+\tfrac{L}{2})\, M(x=-\tfrac{L}{2}) \begin{pmatrix} 0 \\ A_{I-} \end{pmatrix}$$

Produkt der Transfermatrizen:

$$M(\tfrac{L}{2})\, M(-\tfrac{L}{2}) = \begin{pmatrix} \frac{i\kappa+k}{2i\kappa}\, e^{-i(i\kappa-k)\frac{L}{2}} & \frac{i\kappa-k}{2i\kappa}\, e^{-i(i\kappa+k)\frac{L}{2}} \\ \frac{i\kappa-k}{2i\kappa}\, e^{i(i\kappa+k)\frac{L}{2}} & \frac{i\kappa+k}{2i\kappa}\, e^{i(i\kappa-k)\frac{L}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} \frac{k+i\kappa}{2k}\, e^{i(k-i\kappa)\frac{L}{2}} & \frac{k-i\kappa}{2k}\, e^{i(k+i\kappa)\frac{L}{2}} \\ \frac{k-i\kappa}{2k}\, e^{-i(k+i\kappa)\frac{L}{2}} & \frac{k+i\kappa}{2k}\, e^{-i(k-i\kappa)\frac{L}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{e^{\kappa L}}{2k\kappa}\left[2k\kappa\cos kL + (k^2-\kappa^2)\sin kL\right] & \frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\sin kL \\ -\frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\sin kL & \frac{e^{-\kappa L}}{2k\kappa}\left[2k\kappa\cos kL - (k^2-\kappa^2)\sin kL\right] \end{pmatrix}$$

$$\equiv M_{\text{kasten}}$$

Aus Anschlussbedingung folgt:

$$0 \overset{!}{=} M_{\text{kasten},22}\, A_{I-} \overset{A_I \neq 0}{\Longrightarrow} 2k\kappa\cos kL - (k^2-\kappa^2)\sin kL = 0$$

$$\Rightarrow \quad \tan kL = \frac{2k\kappa}{k^2-\kappa^2}$$

$$\xRightarrow{\tan x = \frac{2\tan \frac{x}{2}}{1-\tan^2\frac{x}{2}}} \quad \frac{2\tan\frac{kL}{2}}{1-\tan^2\frac{kL}{2}} = \frac{2\frac{\kappa}{k}}{1-\frac{\kappa^2}{k^2}} = -\frac{2\frac{k}{\kappa}}{1-\frac{k^2}{\kappa^2}}$$

Lösungen:

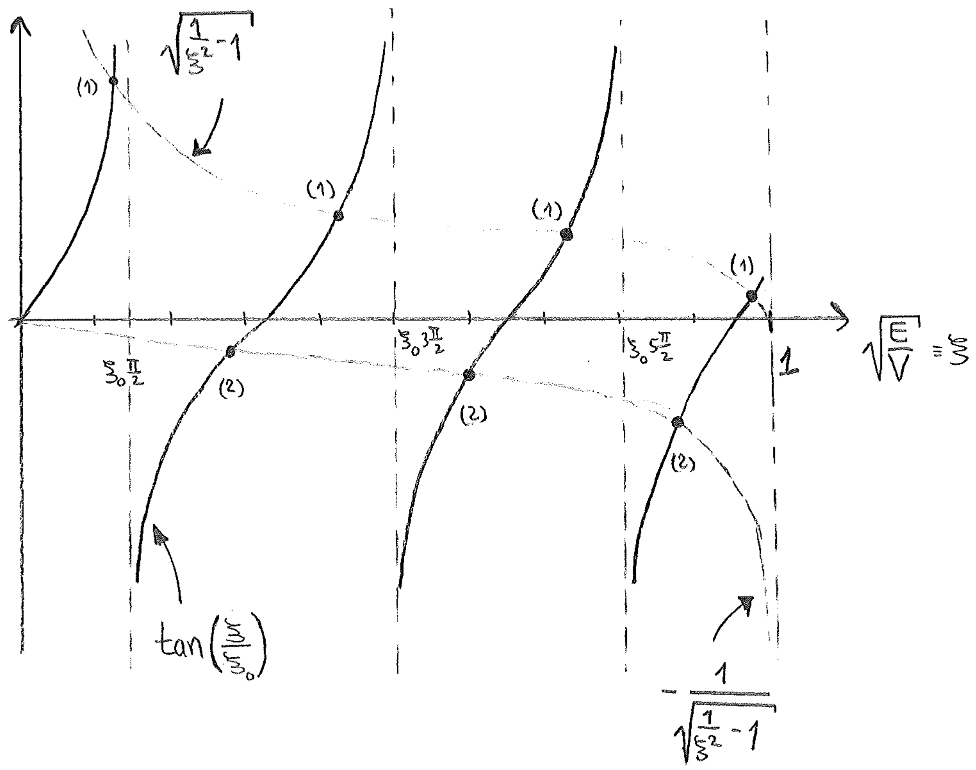
(1) $\tan\frac{kL}{2} = \frac{\kappa}{k}$ oder (2) $\tan\frac{kL}{2} = -\frac{k}{\kappa}$

Mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ folgt:

(1) $\tan\sqrt{\frac{E}{E_0}} = \sqrt{\frac{V}{E}-1}$ oder (2) $\tan\sqrt{\frac{E}{E_0}} = -\frac{1}{\sqrt{\frac{V}{E}-1}}$

mit Energieskala $E_0 = \frac{2\hbar^2}{mL^2}$

Grafische Lösung (z.B. für $\sqrt{\frac{E_0}{V}} \equiv \xi_0 = 0.1$):



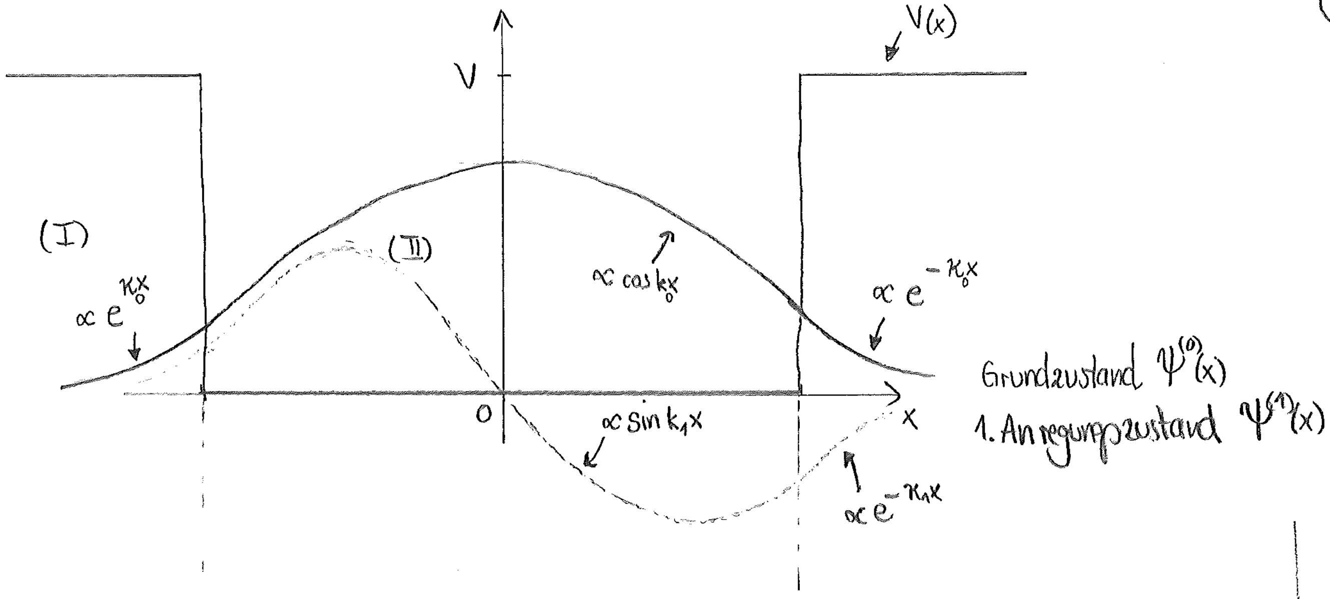
- Schnittpunkte entsprechen Energien der gebundenen Zustände.
- Für $\xi_0 = \sqrt{\frac{E_0}{V}} = 0.1$: Sieben gebundene Zustände.
- Für $\xi_0 = \sqrt{\frac{E_0}{V}} > \frac{2}{\pi}$: Ein gebundener Zustand, auch für V infinitesimal klein (Besonderheit der 1D Quantenmechanik!)

Koeffizienten (klassisch erlaubter Bereich):

$$\begin{pmatrix} A_{II+} \\ A_{II-} \end{pmatrix} = M(x=-\tfrac{L}{2}) \begin{pmatrix} 0 \\ A_{I-} \end{pmatrix} \Rightarrow A_{II+} = \begin{cases} +A_{II-} & \text{für } (1) \\ -A_{II-} & \text{für } (2) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} \psi(-x) & \text{symmetrisch, für } (1) \\ -\psi(-x) & \text{antisymmetrisch, für } (2) \end{cases}$$

Allgemein gilt: Die Wellenfunktionen der gebundenen Zustände in einem symmetrischen Potential sind symmetrisch oder antisymmetrisch (sofern Energie-eigenwert einfach entartet)



25.11.19

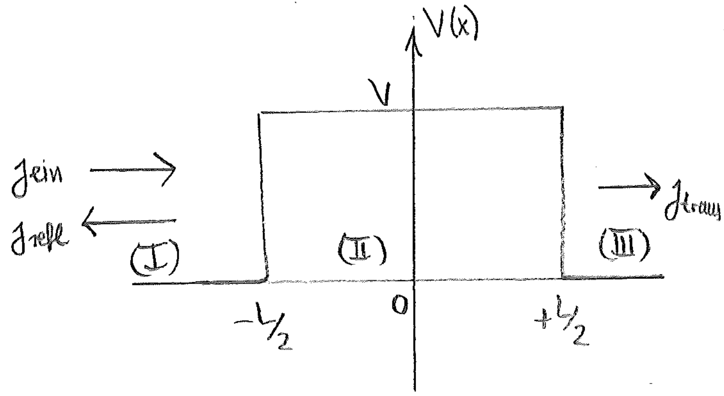
Kontinuierliches Spektrum:

$E > V$: Eigenzustände ungebunden

4.2.2. Streuung an der Kastenpotentialbarriere

Potential:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| \geq L/2 \\ V > 0 & \text{für } |x| < L/2 \end{cases}$$



Spektrum:

- $E < 0$: keine Lösungen
- $E > 0$: kontinuierlich (zweifach entartet)

Allgemeine Lösung (Teilchenstrom): einlaufende Welle, reflektierte Welle

$$(\mathrm{I})\quad x \leq -\frac{L}{2}: \quad \psi_{\mathrm{I}}(x) = A_{\mathrm{I}+} e^{ikx} + A_{\mathrm{I}-} e^{-ikx}$$

$$(\mathrm{II})\quad -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}: \quad \psi_{\mathrm{II}}(x) = A_{\mathrm{II}+} e^{iqx} + A_{\mathrm{II}-} e^{-iqx}$$

$$(\mathrm{III})\quad x > \frac{L}{2}: \quad \psi_{\mathrm{III}}(x) = A_{\mathrm{III}+} e^{ikx} + A_{\mathrm{III}-} e^{-ikx}$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \in \mathbb{R}$ und $q = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} \in \mathbb{C}$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$(\mathrm{I})\quad j_{\mathrm{I}} = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\psi_{\mathrm{I}}^{*}\partial_x\psi_{\mathrm{I}} - (\partial_x\psi_{\mathrm{I}}^{*})\psi_{\mathrm{I}}\right] = \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|A_{\mathrm{I}+}|^2}_{\substack{\text{einlaufende}\\ \text{Stromdichte}\\ j_{\text{ein}} \overset{!}{=} 1}} - \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|A_{\mathrm{I}-}|^2}_{\substack{\text{reflektierte}\\ \text{Stromdichte}\\ j_{\text{refl.}} \overset{!}{=} |r|^2}} = 1 - |r|^2$$

mit z.B. $A_{\mathrm{I}+} = \frac{1}{\sqrt{\hbar k/m}}$ und $A_{\mathrm{I}-} = \frac{r}{\sqrt{\hbar k/m}}$ Reflektionsamplitude

$$(\mathrm{III})\quad j_{\mathrm{III}} = \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|A_{\mathrm{III}+}|^2}_{\substack{\text{transmittierte}\\ \text{Stromdichte } j_{\text{trans}} \overset{!}{=} |t|^2}} - \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|A_{\mathrm{III}-}|^2}_{=0 \text{ (von links einlaufende Welle)}}$$

mit z.B. $A_{\mathrm{III}+} = \frac{t}{\sqrt{\hbar k/m}}$ und $A_{\mathrm{III}-} = 0$ Transmissionsamplitude

Wahrscheinlichkeitserhaltung:

$$\underbrace{j_{\text{ein}}}_{1} = \underbrace{j_{\text{refl}}}_{|r|^2} + \underbrace{j_{\text{trans}}}_{|t|^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{R + T = 1}$$

mit Reflektionskoeffizient $R = |r|^2$ und Transmissionskoeffizient $T = |t|^2$

Anschlussbedingungen:

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M\left(\tfrac{L}{2}\right) M\left(-\tfrac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$$

Transfermatrizen

Lösung:

$$\boxed{\begin{aligned} r &= \frac{e^{-ikL}\,(k^2-q^2)}{k^2+q^2+2ikq\cot(qL)} \\[1em] t &= \frac{4\,e^{i(q-k)L}\,kq}{(k+q)^2 - e^{i2qL}(k-q)^2} \end{aligned}}$$

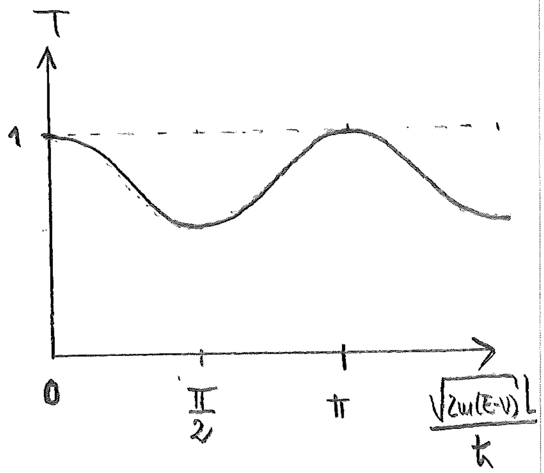
Transmissionswahrscheinlichkeit ($q \in \mathbb{C}$):

$$T = |t|^2 = \frac{8k^2q^2}{k^4+6k^2q^2+q^4-(k^2-q^2)^2\cos(2qL)}$$

Diskussion:

(a) $E > V$: $q = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ reell

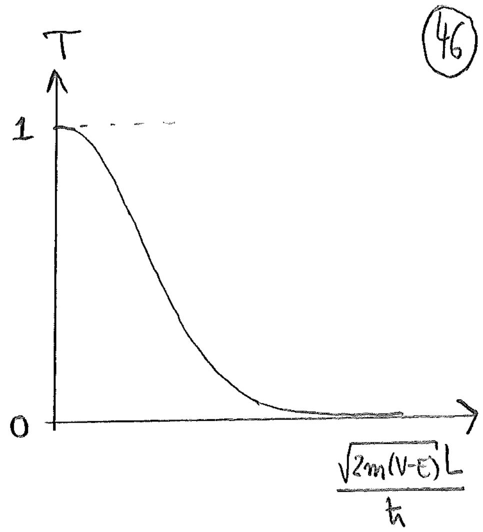
$$\boxed{T = \frac{E(E-V)}{E(E-V) + \frac{V^2}{4}\sin^2\left(\frac{\sqrt{2m(E-V)}\,L}{\hbar}\right)}}$$



Volle Transmission nur für $L = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}}\, n\pi \quad , n \in \mathbb{Z}$

(b) $E < V$: $\quad q = i\,\dfrac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ rein imaginär

$$\boxed{T = \frac{E(V-E)}{E(V-E) + \frac{V^2}{4}\sinh^2\left(\frac{\sqrt{2m(V-E)}\,L}{\hbar}\right)}}$$



$[\sin(ix) = i\sinh x]$

Endlich Transmission durch klassisch verbotenen Bereich!

$\Rightarrow$ quantenmechanischer <u>Tunneleffekt</u>

Grenzfall $\dfrac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L \gg 1$:

$$\boxed{T \approx \frac{16\,E(V-E)}{V^2}\, e^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}\,2L}{\hbar}}}$$

$[\sinh x = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})]$

Für makroskopische Barrieren ist die Tunnelwahrscheinlichkeit exponentiell unterdrückt.

4.3. Delta-Potentiale

Stationäre Schrödinger-Gleichung mit Delta-Potential:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{\hbar^2}{ma}\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Bemerkungen:

- Potential ist repulsiv (attraktiv) für $a>0$ $(a<0)$
- $\delta(x)$ hat "unendlichen Sprung": $\psi'(x)$ <u>nicht stetig</u> bei $x=0$

  Anschlussbedingung:

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{\hbar^2}{2ma}\delta(x)\psi(x)\right] \overset{!}{=} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx\, E\,\psi(x)$$

Stammfunktion von $\psi(x)$

$$\Rightarrow \; -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi'(\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)\right) + \frac{\hbar^2}{ma}\psi(0) \overset{!}{=} E\left(\Psi(\varepsilon)-\Psi(-\varepsilon)\right)$$

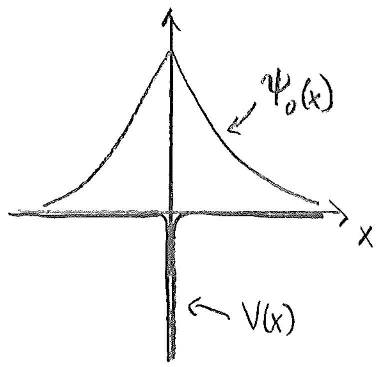
$$\overset{\varepsilon\to 0}{\Rightarrow} \quad \psi'(0+)-\psi'(0-) \overset{!}{=} \frac{2}{a}\psi(0)$$

[$\psi(0+)=\psi(0-)$ stetig]

4.3.1. Gebundener Zustand des attraktiven Delta-Potentials

Lösung für $a<0$ und $E<0$:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{|a|}}\, e^{-\frac{|x|}{|a|}} \quad \text{mit } E_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}$$



[Übungsaufgabe 7.2]

4.3.2. Streuung am Delta-Potential

Lösung für $E>0$ (von links einlaufende Welle):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k/m}} \begin{cases} e^{ikx} + r\, e^{-ikx} & \text{für } x<0 \\ t\, e^{ikx} & \text{für } x>0 \end{cases}$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ reell.

Anschlussbedingungen:

$\psi(x)$ stetig : $\quad 1 + r = t$

Sprung in $\psi'(x)$: $\quad \psi'(0+) - \psi'(0-) \overset{!}{=} \frac{2}{a}\psi(0) \Leftrightarrow ikt - (ik - ikr) \overset{!}{=} \frac{2}{a} t$

Transmissions-/Reflektionskoeffizienten:

$$T = |t|^2 = \frac{(ak)^2}{1+(ak)^2} \quad \text{und} \quad R = |r|^2 = 1 - T = \frac{1}{1+(ak)^2}$$

[Übungsaufgabe 8.2]