
Quantenmechanik I

SS 2025

Claudius Gros
Institut für Theoretische Physik
Goethe Universität Frankfurt

Chapter 2

Eindimensionale Systeme

2.1 Stationäre Schrödinger-Gleichung

Seperation der Variabeln

Ist das Potential $V(\vec{x})$ von der Zeit t unabhängig, so kann man für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung $i\hbar\dot{\psi}(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t)$ nach Lösungen der Form

$$\psi(\vec{x}, t) = \sigma(t)u(\vec{x})$$

suchen (Separation der Variablen). Dies führt zu

$$i\hbar u(\vec{x}) \frac{d}{dt} \sigma(t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta u(\vec{x}) + V(\vec{x})u(\vec{x}) \right] \sigma(t) .$$

Dividiert man durch $\sigma(t)u(\vec{x}) \neq 0$, so erhält man

$$i\hbar \frac{1}{\sigma(t)} \frac{d\sigma(t)}{dt} = \frac{1}{u(\vec{x})} \mathbf{H} u(\vec{x}) , \quad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\vec{x})$$

Da die linke Seite eine Funktion der unabhängigen Variablen t , die rechte Seite eine Funktion der unabhängigen Variablen $\vec{x}$ ist, muß

$$i\hbar \frac{1}{\sigma(t)} \frac{d\sigma(t)}{dt} = E = \text{const.}$$

gelten, d.h.

$$\sigma(t) = C e^{-iEt/\hbar}, \quad C = \text{const.}$$

und

$$\mathbf{H} u(\vec{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta u(\vec{x}) + V(\vec{x})u(\vec{x}) \right) = E u(\vec{x})$$

Dies ist die zeitunabhängige oder *stationäre* Schrödinger-Gleichung. Die stationäre Schrödinger-Gleichung hat die Form einer Eigenwert-Gleichung.

Eigenwerte und Eigenfunktionen

Sei $\mathbf{A}$ eine $n \times n$ Matrix in einem n -dimensionalen Vektorraum, und $\vec{v}$ ein n dimensionaler Vektor mit der Eigenschaft

$$\mathbf{A}\vec{v} = a\vec{v}, \quad a \in \mathbb{R},$$

so ist a ein Eigenwert von $\mathbf{A}$ und $\vec{v}$ ein Eigenvektor von $\mathbf{A}$ zum Eigenwert a : $\vec{v} = \vec{v}_a$. Analog ist mit

$$u(\vec{x}) = u_E(\vec{x}), \quad \mathbf{H} u_E(\vec{x}) = E u_E(\vec{x})$$

$u(\vec{x})$ eine *Eigenfunktion* des Schrödinger-Operators $\mathbf{H}$, hier zum Eigenwert E .

Überlagerung zweier Lösungen

Seien $\psi_j(\vec{x}, t) = \sigma_j(t)u_{E_j}(\vec{x})$ zwei Lösungen der Schrödinger-Gleichung, mit

$$\sigma_j(t) = C_j e^{-i E_j t / \hbar} \quad \text{und} \quad u_{E_j}(\vec{x}), \quad j = 1, 2,$$

so ist auch jede linear Superposition von ψ_1 und ψ_2 eine Lösung. Das heisst, es gilt

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t), \quad \psi(\vec{x}, t) = \alpha_1 \psi_1(\vec{x}, t) + \alpha_2 \psi_2(\vec{x}, t),$$

mit konstanten α_j .

Eigenwert-Spektren

Die Eigenwerte des Hamilton-Operators können diskret oder kontinuierlich sein:

$$\begin{array}{ll} -\infty < E_1, \dots, E_\nu, \dots & \text{diskrete Eigenwerte,} \\ \{-\infty < E < \infty\} & \text{kontinuierlich verteilte Eigenwerte.} \end{array}$$

Wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung sind beliebige Überlagerungen

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\nu=1}^{\infty} C_\nu e^{-i E_\nu t / \hbar} u_{E_\nu}(\vec{x}) + \int dE C(E) e^{-i E t / \hbar} u_E(\vec{x})$$

der orthonormierten Eigenfunktionen $u_{E_\nu}(\vec{x})$ und $u_E(\vec{x})$ wiederum Lösungen von $\mathbf{H}$, mit $C_\nu \in \mathcal{C}$ und $C(E) \in \mathcal{C}$ und der Bedingung für die Normierung der Wellefunktion,

$$\sum_{\nu} |C_\nu|^2 + \int dE |C(E)|^2 = 1.$$

Man beachte, dass die Energie unten beschränkt sein muss, da das System sonst nicht stabil ist: $E \geq B > -\infty$.

Eigenfunktionen des Impulsoperators

Als Beispiel betrachten wir die Eigenfunktionen $e_p(x)$ des Impulsoperators $\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ zum reellen Eigenwert p :

$$\mathbf{P} e_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e_p(x) = p e_p(x).$$

Die Eigenlösungen sind offenbar $e_p(x) = C e^{ipx/\hbar}$, mit $C = \text{const.}$, also ebene Wellen.

2.2 Eindimensionale Potentialstufe

Wir betrachten das eindimensionale Potential

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & \text{für} & \quad x < 0 \\ V(x) &= V_0 > 0 & \text{für} & \quad x > 0 \end{aligned}$$

Die zugehörige zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung zum Eigenwerte E lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = E u(x)$$

Stetigkeits-Bedingungen am Potentialsprung

Das Potential springt bei $x = 0$ um V_0 . Dahe stellt sich die Frage, ob die Wellenfunktion auch Diskontinuitäten aufweist. Aus

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) u(x)$$

folgt, daß bei stetigem $u(x)$ die zweite Ableitung von u (linke Seite) bei $x = 0$ einen endlichen Sprung um $2m V_0 / \hbar^2 u(0)$ macht.

Die erste Ableitung du/dx ist dagegen stetig:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{du}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{du}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx (E - V) u(x) = 0, \end{aligned}$$

da der Integrand endlich ist und das Integrationsintervall gegen Null tendiert.

Die *Anschlussbedingung* für $x = 0$ ist also: $u(x)$ und $u'(x)$ sind stetig. Allgemein spricht man auch von *Randbedingungen*.

2.2.1 Streuzustände

Wenn das Potential konstant ist, $V = 0$ oder $V = V_0$, wird die stationäre-Schrödinger Gleichung durch ebene Wellen gelöst:

$$u(x) = e^{\pm i k x}, \quad \frac{(\hbar k)^2}{2m} = E - V,$$

modulo einer Normierungskonstanten. Dabei entspricht $+k$ und $-k$ links-, bzw. rechtslaufenden Wellen.

Einlaufende und reflektierte Welle

Wir betrachten $E > V_0$, die Eigenenergie des Zustandes ist also größer als die Potentialstufe. Klassisch würde ein von links einfallendes Elektron daher einfach durchlaufen. Um festzustellen, ob dies auch quantenmechanisch der Fall ist, gehen wir von der allgemeinen Lösung aus. D.h. wir betrachten $x \leq 0$ und

$$x \leq 0 : \quad u(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0$$

also eine allgemeine Superposition von einlaufender und reflektierte Welle. Zur einlaufenden Welle ($+k$) wird die rücklaufende Welle ($-k$) mit Amplitude R zugemischt. Der entsprechende Teilchenfluss (die Wahrscheinlichkeits-Stromdichte) ist

$$s(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(u^* \frac{du}{dx} - u \frac{du^*}{dx} \right), \quad \boxed{s_- = \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2)}_{x \leq 0}$$

da sich die Mischterme gegenseitig aufheben.

- e^{ikx} beschreibt eine von links einfallende Welle mit Fluss $\hbar k/m > 0$
- $R e^{-ikx}$ beschreibt eine an der Stufe reflektierte Welle mit Fluss $-|R|^2 \hbar k/m$.

Die Anschlussbedingung bei $x = 0$ bestimmt dabei R .

Transmitierte Welle

Die Lösung für $x \geq 0$ lautet

$$x \geq 0 : \quad u(x) = T e^{iqx}, \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}, \quad s_+ = \frac{\hbar q}{m} |T|^2$$

Die ebenfalls mögliche Lösung e^{-iqx} lassen wir weg, da von rechts keine Welle einfallen soll. $s_+ = \frac{\hbar q}{m} |T|^2$ ist der nach rechts durchlaufende Strom.

Welle	Fluss	Interpretation
e^{ikx}	$\hbar k/m$	Einlaufende Welle
$R e^{-ikx}$	$- R ^2 \hbar k/m$	R : Reflektions-Koeffizient
$T e^{iqx}$	$ T ^2 \hbar q/m$	T : Transmissions-Koeffizient

Stetigkeitsbedingungen

$u(x)$ ist bei $x = 0$ nur dann stetig wenn

$$1 + R = T$$

erfüllt ist. Analog ist die Ableitung du/dx bei $x = 0$ stetig falls

$$ik(1 - R) = iqT$$

gilt. Zusammen folgt

$$R = \frac{k - q}{k + q}, \quad T = \frac{2k}{k + q}.$$

Damit sind R und T als Funktionen von E und V_0 bekannt.

Teilchenstromerhaltung

Man rechnet unmittelbar nach, dass

$$\frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2$$

gilt. Damit ist $s(x)$ ebenfalls bei $x = 0$ stetig. Das war zu erwarten, da der Teilchenstrom aufgrund der Kontinuitätsgleichung erhalten ist.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik, für die für $E > V_0$ kein Teilchen an der Potentialstufe reflektiert würde, wird in der Quantenmechanik ein endlicher Bruchteil, $|R|^2$, des Elektrons reflektiert.

2.2.2 Reflektierte Zustände

Wir betrachten nun $E < V_0$. Für $x \leq 0$ ist die allgemeine Lösung durch

$$x \leq 0 : \quad u(x) = A_1 \sin kx + B_1 \cos kx, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

gegeben, für $x \geq 0$ analog durch

$$x \geq 0 : \quad u(x) = A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Aus physikalischen Gründen (Normierbarkeit) kann $u(x)$ für $x > 0$ nicht beliebig groß werden, woraus $B_2 = 0$ folgt.

Stetigkeitsbedingungen

Die Bedingung der Stetigkeit von $u(x)$ und von du/dx für $x = 0$ ergibt

$$A_2 = B_1, \quad A_1 k = -A_2,$$

woraus

$$\begin{aligned} x \leq 0 : \quad u(x) &= A_1 \left(\sin kx - \frac{k}{\kappa} \cos kx \right) \\ x \geq 0 : \quad u(x) &= -A_1 \frac{k}{\kappa} e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

folgt.

Bemerkungen

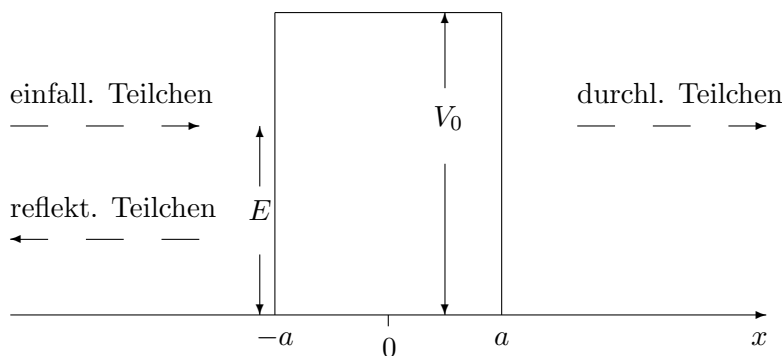
- Es ist überall $s(x) = 0$. Stehende Wellen transportieren keine Teilchen.

- Im Gegensatz zum klassischen Fall dringt ein Bruchteil der Teilchen auch in das "verbotene" Gebiet $x > 0$ ein. Im klassisch verbotenen Bereich fällt die Teilchendichte $|u(x)|^2$ exponentiell ab, mit der Eindringtiefe

$$\lambda = \frac{1}{2\kappa} = \frac{\hbar/2}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

Diese Phänomene werden an allen Grenzflächen beobachtet, sie sind u.A. in der Halbleiterphysik von Bedeutung.

2.3 Potentialbarriere



Das Potential ist:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ V_0 > 0 & \text{für } -a < x < a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$

Wellenfunktion

Wir nehmen an, dass von links Teilchen mit der Energie $E < V_0$ einfallen und zum Teil reflektiert werden. Von rechts sollen keine Teilchen einfallen. Wir haben somit

$$\begin{aligned} x < -a : \quad u(x) &= e^{ikx} + Re^{-ikx} & k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ -a < x < a : \quad u(x) &= Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & \kappa &= \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \\ x > a : \quad u(x) &= Te^{ikx} . \end{aligned}$$

Stetigkeitsbedingungen

Die Stetigkeit von $u(x)$ und du/dx bei $x = \pm a$ führt auf folgendes lineare Gleichungssystem, für die vier Größen R , A , B und T :

$$\begin{aligned} x = -a : \quad & \begin{cases} e^{-ika} + Re^{ika} & = & Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a} \\ ik(e^{-ika} - Re^{ika}) & = & \kappa(-Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a}) \end{cases} \\ x = +a : \quad & \begin{cases} Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} & = & Te^{ika} \\ \kappa(-Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a}) & = & ikTe^{ika} \end{cases} \end{aligned}$$

Aus den beiden ersten Gleichungen ergibt sich

$$\begin{aligned} 2Ae^{\kappa a} &= \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{-ika} + R \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika} \\ 2Be^{-\kappa a} &= \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{-ika} + R \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika} \end{aligned}$$

durch Addition und Subtraktion; ebenso aus den beiden letzten Gleichungen:

$$\begin{aligned} 2Ae^{-\kappa a} &= \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika} T \\ 2Be^{\kappa a} &= \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika} T \end{aligned}$$

Die Quotienten führen zu

$$\frac{A}{B} = \frac{\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{-ika} + R \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika}}{\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{-ika} + R \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika}} e^{-2\kappa a} = \frac{\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika}}{\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) e^{ika}} e^{2\kappa a} .$$

Mit $\rho = k/\kappa$ erhalten wir hieraus

$$\left[(1 + \rho^2) e^{-2ika} + R(1 + i\rho)^2 \right] e^{-2\kappa a} = \left[(1 + \rho^2) e^{-2ika} + R(1 - i\rho)^2 \right] e^{2\kappa a} ,$$

oder

$$(1 + \rho^2) e^{-2ika} \sinh(2\kappa a) = R \left[(1 + 2i\rho - \rho^2) e^{-2\kappa a} - (1 - 2i\rho - \rho^2) e^{2\kappa a} \right] .$$

Setzen wir dies in den Quotienten aus den ersten beiden Gleichungen ein, so ergibt sich:

$$R = e^{-2ika} \frac{(\kappa^2 + k^2) \sinh(2\kappa a)}{(k^2 - \kappa^2) \sinh(2\kappa a) + 2i\kappa k \cosh(2\kappa a)}$$

Analog findet man

$$T = e^{-2ika} \frac{2i\kappa k}{(k^2 - \kappa^2) \sinh(2\kappa a) + 2i\kappa k \cosh(2\kappa a)}$$

Daraus bekommt man folgende Absolutquadrate:

$$\begin{aligned} |R|^2 &= \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a)}{(\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 4\kappa^2 k^2 \cosh^2(2\kappa a)} \\ |T|^2 &= \frac{4\kappa^2 k^2}{(\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 4\kappa^2 k^2 \cosh^2(2\kappa a)} \end{aligned}$$

d.h. $|R|^2 + |T|^2 = 1$, denn $\cosh^2 - \sinh^2 = 1$.

Tunneleffekt

Obwohl $E < V_0$ können Teilchen durch die Barriere *tunneln*, wobei vor allem die Größe

$$\kappa a = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2ma^2(V_0 - E)}$$

für den Bruchteil der durchlaufenden Elektronen verantwortlich ist.

Klassischer Grenzfall

Wir betrachten nun den Fall kleiner Tunnelwahrscheinlichkeit, also z.B. $E \ll V_0$ oder allg.

$$\kappa a \gg 1 : \quad \sinh(2\kappa a) \approx \frac{1}{2} e^{+2\kappa a} ,$$

d.h.

$$\boxed{|T|^2 \approx \frac{(4\kappa k)^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a}} \quad \kappa a = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2ma^2(V_0 - E)} .$$

Wir bemerken, daß im *klassischen Grenzfall* $\hbar \rightarrow 0$ das Produkt κa divergiert, mit $\kappa a \rightarrow \infty$, die Tunnelrate ist daher exponentiell unterdrückt.

Allgemeine Tunnelbarriere

Ein allgemeines Tunnelpotential $V(x)$ kann man näherungsweise im klassischen Grenzfall behandeln. Dafür berücksichtigt man in obiger Formel nur die Exponentialfunktion, womit die Transmissionskoeffizienten näherungsweise multiplikativ sind. Teilen wir die Barriere in kleine Abschnitte, $a = a_1 + a_2 + \dots$, dann gilt für die zugehörigen Transmissionskoeffizienten

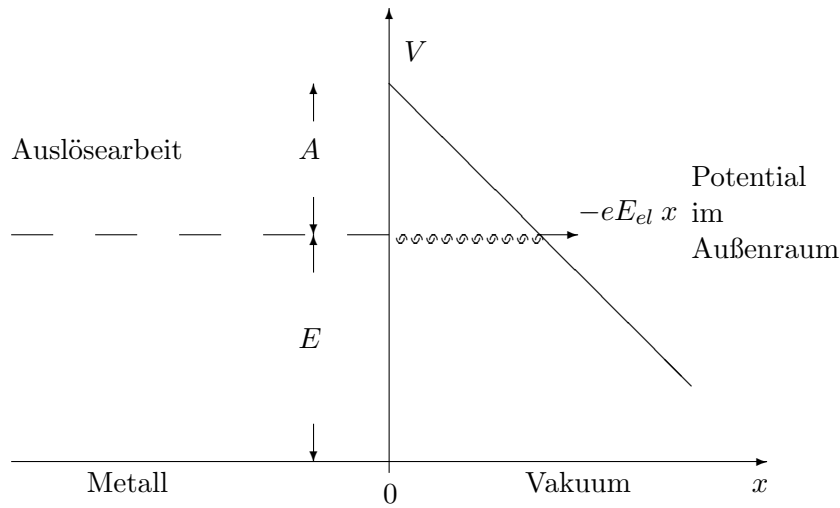
$$|T_a|^2 \approx |T_{a_1}|^2 \cdot |T_{a_2}|^2 \cdot \dots$$

(Multiplikationssatz der Wahrscheinlichkeiten).

Approximiert man einen kontinuierlichen Potentialberg $V(x)$ durch immer kleinere Stufen der Dicke a_i , so erhält man, abgesehen von einem Normierungsfaktor,

$$|T| \approx e^{-2 \int dx \sqrt{(2m/\hbar^2)(V(x) - E)}}$$

Der Tunneleffekt ist ein wichtiges physikalischen Phänomen. Er ist z.B. für den Kernzerfall sowie für die kalte Emission von Elektronen aus einer Metalloberfläche (Kathode) verantwortlich.



2.4 Unendlich tiefer Potentialtopf

Wir studieren nun den Potentialverlauf

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & \text{für } -a < x < a \\ V(x) &= \infty & \text{sonst} \end{aligned}$$

In Kap. 2.2 haben wir gesehen, daß die Wellenfunktion mit Energie $E < V_0$ in der Potentialstufe exponentiell unterdrückt wird. Für den unendlich tiefen Potentialtopf, mit $V_0 \rightarrow \infty$, folgt also dass $u(x) = 0$ für $|x| \geq a$ gilt. Im Topf selbst hat man

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} u.$$

Keine Lösungen für $E < 0$

Falls $E < 0$ ist, so hat man für $-a < x < a$ die Lösungen

$$u(x) = A_1 e^{\kappa x} + A_2 e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} (-2mE)^{\frac{1}{2}},$$

mit denen man die Randbedingungen $u(a) = u(-a) = 0$ jedoch nur mit $A_1 = A_2 = 0$ erfüllen kann. Es gibt also keine Lösungen für das Problem mit $E < 0$.

Lösungen für $E > 0$

Für $E > 0$ gilt

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = -k^2 u(x), \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

für $-a < x < a$, mit den Lösungen

$$\begin{aligned} u^{(-)}(x) &= A^{(-)} \sin kx & (\text{ungerade Funktion in } x) \\ u^{(+)}(x) &= A^{(+)} \cos kx & (\text{gerade Funktion in } x) \end{aligned}$$

Antisymmetrische Lösung

Aus der Randbedingung $\sin(ax) = 0$ für die ungerade (antisymmetrische) Lösung folgt $ka = n\pi$, mit $n = 1, 2, 3, \dots$. Es sind also nur diskrete (bestimmte) Werte von k (und damit der Energie E) mit der Randbedingung verträglich. Die Eigenwerte sind somit *quantisiert*.

Die zulässigen Energiewerte sind

$$E_n^{(-)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Normierung der zugehörigen Eigenfunktionen

$$u_n^{(-)} = A^{(-)} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

gemäß $\int_{-a}^a u^*(x) u(x) dx = 1$ ergibt $A^{(-)} = (a)^{-\frac{1}{2}}$, also

$$u_n^{(-)}(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Symmetrische Lösung

Für die gerade (symmetrische) Lösung folgt aus $\cos ka = 0$, dass hier $ka = (n + 1/2)\pi$ gilt, wobei n eine ganze Zahl ist. Damit lauten die Eigenwerte

$$E_n^{(+)} = \frac{(n + 1/2)^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Die zugehörigen (normierten) Eigenfunktionen sind

$$u_n^{(+)} = a^{-\frac{1}{2}} \cos\left[(n + 1/2) \frac{\pi x}{a}\right], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

rundzustandsenergie

Der tiefstmögliche Energiewert –die *Grundzustandsenergie*– ist

$$E_{n=0}^{(+)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Der niedrigste antisymmetrische Zustand, $u_{n=1}^{(-)}(x)$, hat die eine höhere Energie, $E_{n=1}^{(-)} = 4E_{n=0}^{(+)}$.

Knoten der Wellenfunktion

Die Energien $E_n^{(\pm)}$ sind jeweils um so größer, je größer die Zahl der Nullstellen (*Knoten*)

der zugehörigen Eigenfunktionen $u_n^{(\pm)}(x)$ im Intervall $[-a, +a]$ ist. Je mehr Knoten, desto schneller verändert sich die Wellefunktion, desto grösser der Gradient, desto grösser damit auch die kinetische Energie.

Die Wellenfunktion $u_{n=0}^{(+)} = a^{-1/2} \cos \pi x / (2a)$ des Grundzustandes hat keine Nullstelle für $|x| < a$.

Orthogonalität

Mittels der Beziehungen

$$\begin{aligned} 2 \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 &= \cos(\alpha_1 + \alpha_2) + \cos(\alpha_1 - \alpha_2) , \\ 2 \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 &= \cos(\alpha_1 - \alpha_2) - \cos(\alpha_1 + \alpha_2) , \\ 2 \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 &= \sin(\alpha_1 + \alpha_2) + \sin(\alpha_1 - \alpha_2) \end{aligned}$$

erhält man mit $\sigma = \pm$ die Orthogonalitätsbeziehungen

$$\int_{-a}^a dx (u_m^{(\sigma)})^*(x) u_n^{(\sigma)}(x) = \delta_{mn}, \quad \int_{-a}^a dx (u_m^{(+)})^*(x) u_n^{(-)}(x) = 0$$

Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten $E_n^{(\pm)}$ sind bezüglich des *Skalarproduktes*

$$(\psi, \phi) = \int dx \psi^*(x) \phi(x)$$

zueinander orthogonal:

$$(u_n^{(\gamma)}, u_m^{(\alpha)}) = \delta_{n,m} \delta_{\gamma,\alpha}, \quad \gamma, \alpha = \pm .$$

Das war zu erwarten, da der Hamilton-Operator symmetrisch ist, und symmetrische Matrizen orthogonale Eigenfunktionen haben. Mehr dazu später.

Erwartungswerte

Die Mittelwerte $\langle x \rangle$ und $\langle p \rangle$ verschwinden. Z.B. ergibt sich

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^a dx \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 0$$

da der Integrand antisymmetrisch in x ist. Damit reduzieren sich die Schwankungsquadrate zu

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle .$$

Impulsunschärfe

Mit $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m$ und $\mathbf{P}^2 = \hbar \nabla^2$ gilt

$$\langle p^2 \rangle_n^{(\pm)} = 2m E_n^{(\pm)} = \int_{-a}^a dx u_n^{(\pm)}(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) u_n^{(\pm)}(x)$$

für die Impulstunschärfe.

Ortsunschärfe

Mit der Substitution $y = \pi x/a$ erhalten wir ferner

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_n^{(-)} &= \frac{1}{a} \int_{-a}^a dx x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{ay}{\pi} \right)^2 \sin^2 ny dy\end{aligned}$$

für das Schwankungsquadrat des Orts-Operators. Da $\sin^2 \alpha = (1 - \cos 2\alpha)/2$, erhält man nach mehrmaliger partieller Integration

$$\langle x^2 \rangle_n^{(-)} = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2} \right).$$

Orts- und Impulsunschärfe

Für die ungeraden Eigenfunktionen lautet das Gesamtergebnis damit

$$(\Delta p)_n^{(-)} = \frac{n\pi\hbar}{a}; \quad (\Delta x)_n^{(-)} = \frac{a}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Mit $\cos^2 \alpha = (1 + \cos 2\alpha)/2$ findet man analog

$$(\Delta p)_n^{(+)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi\hbar}{a}; \quad (\Delta x)_n^{(+)} = \frac{a}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 (n + \frac{1}{2})^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

für die ungeraden Wellenfunktionen.

Unschärferelationen

Die Unschärferelationen lauten:

$$\begin{aligned}(\Delta x)_n^{(-)} \cdot (\Delta p)_n^{(-)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \left[n^2 \pi^2 - 3/2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ (\Delta x)_n^{(+)} \cdot (\Delta p)_n^{(+)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \left[(n + 1/2)^2 \pi^2 - 3/2 \right]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

Minimale Unschärfe

Das Produkt der Unschärfen $\Delta x \cdot \Delta p$ hängt nicht von a ab und wächst mit n . Für den Grundzustand $u_0^{(+)}$ hat man

$$(\Delta x)_0^{(+)} \cdot (\Delta p)_0^{(+)} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{4} \pi^2 - \frac{3}{2} \right)^{\frac{1}{2}} = 0.568 \hbar > \frac{\hbar}{2}$$

d.h. die allgemeine Heisenberg'sche Unschärferelation $(\Delta \mathbf{P}) \cdot (\Delta \mathbf{Q}) > \hbar/2$ ist erfüllt.

2.5 Potentialtopf mit endlicher Tiefe

Es sei

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| > a \\ -V_0 < 0 & \text{für } |x| < a \end{cases}$$

Die Lösungen zu positiver Energie erhält man durch analytische Fortsetzung ($\kappa \rightarrow -i\kappa$) der Lösungen für die Potentialbarriere (siehe Kap. 2.3).

Gebundene Zustände

Die Lösungen zu negativen Energien,

$$-V_0 < E < 0 ,$$

entsprechen klassisch gebundenen Zuständen, d.h. für $|x| \gg a$ sollte die Wellenfunktion abfallen. Demnach kommen folgende Lösungen der Schrödinger-Gleichung in Frage:

$$\begin{aligned} x < -a : \quad u(x) &= B_- e^{\kappa x} \\ -a < x < +a : \quad u(x) &= A_1 \cos qx + A_2 \sin qx \\ x > a : \quad u(x) &= B_+ e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

mit

$$q = \sqrt{2m(V_0 + E)} / \hbar, \quad \kappa = \sqrt{-2mE} / \hbar .$$

Dabei wurde $E = (\hbar\kappa)^2/(2m) = (\hbar q)^2/(2m) - V_0$ verwendet.

Stetigkeitsbedingungen

Die Forderung nach Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung für $x = \pm a$ gibt die Bedingungen

$$\begin{aligned} B_- e^{-\kappa a} &= A_1 \cos qa - A_2 \sin qa \\ \kappa B_- e^{-\kappa a} &= q (A_1 \sin qa + A_2 \cos qa) \\ B_+ e^{-\kappa a} &= A_1 \cos qa + A_2 \sin qa \\ \kappa B_+ e^{-\kappa a} &= q (A_1 \sin qa - A_2 \cos qa) \end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$\kappa = q \frac{A_1 \sin qa + A_2 \cos qa}{A_1 \cos qa - A_2 \sin qa} = q \frac{A_1 \sin qa - A_2 \cos qa}{A_1 \cos qa + A_2 \sin qa} ,$$

d.h. A_1 oder A_2 muss verschwinden. Die Lösungen müssen daher vollständig symmetrische oder antisymmetrisch sein,

$$u^{(+)}(x) = A_1 \cos q^{(+)}x , \quad u^{(-)}(x) = A_2 \sin q^{(-)}x .$$

Später werden wir zeigen, daß dies eine Folge der Symmetrieeigenschaften des Hamilton-Operators ist, er ist invariant unter der Spiegelung $x \leftrightarrow -x$.

Eigenwertgleichungen

Die Gleichungen

$$\boxed{\kappa^{(+)} = q^{(+)} \tan(q^{(+)}a) \quad \kappa^{(-)} = -q^{(-)} \cot(q^{(-)}a)}$$

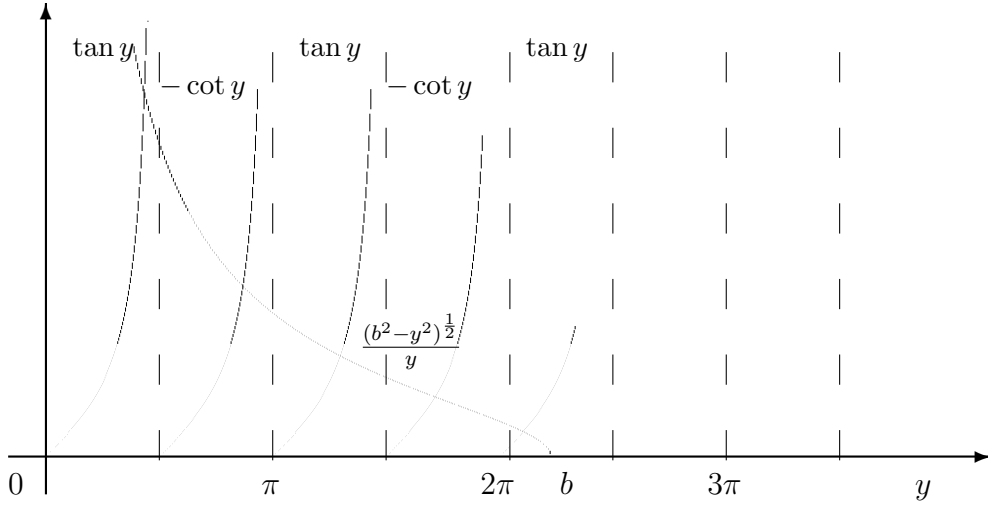
bestimmen die zulässigen Eigenwerte $E^{(+)}$ und $E^{(-)}$. Mit $b^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$, bzw. $y^{(\pm)} = aq^{(\pm)}$, finden wir

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{-E} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{V_0 - \frac{(q\hbar)^2}{2m}} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} - (qa)^2}.$$

Die transzendenten Gleichungen

$$\boxed{\sqrt{b^2 - (y^{(+)})^2}/y^{(+)} = \tan y^{(+)}, \quad \sqrt{b^2 - (y^{(-)})^2}/y^{(-)} = -\cot y^{(-)}}$$

bestimmen somit $q^{(\pm)}$ und daher auch die Eigenwerte $E^{(\pm)} = (\hbar q^{(\pm)})^2/(2m) - V_0$. Sie können graphisch gelöst werden.



Dabei divergiert $\tan y = \sin y / \cos y$ ($\cot y = \cos y / \sin y$) bei 2π -Vielfachen von 0 ($\pi/2$). Die Anzahl der gebundenen Zustände hängt von dem Wert von $b^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$ ab.

Symmetrische gebundene Zustände

Wie klein b^2 auch sein mag, es gibt immer zumindest einen gebundenen Zustand mit $0 < y^{(+)} < \pi/2$. Dieses Resultat gilt für den hier betrachteten Fall eines 1-dimensionalen Potentialtopfes. Sehr flache 3-dimensionale Potentialtöpfe haben keine gebundene Zustände.

Antisymmetrische gebundene Zustände

Einen antisymmetrischen Eigenwert $E^{(-)} < 0$ gibt es nur, falls $(b^2 - \pi^2/4)^{1/2} > 0$, d.h. falls

$$2mV_0a^2/\hbar^2 > \frac{\pi^2}{4}.$$

Tiefer Topf

Für sehr große $b^2 \gg y^2$ hat man näherungsweise die Lösungen

$$y^{(+)} \approx \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n = 0, 1, \dots; \quad y^{(-)} \approx n \pi, \quad n = 1, \dots,$$

d.h. die Lösungen gehen in die des Topfes mit unendlich hohen Wänden über, siehe Kap. 2.4, mit $b^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$.

2.6 Paritätsoperator

Beim Potentialtopf zerfallen die Eigenlösungen von $\mathbf{H}$ in symmetrische und antisymmetrische. Dies legt die Definition eines ‘Spiegelungs’- oder auch ‘Paritäts’-Operator nahe. Wir bezeichnen mit $\mathbf{\Pi}$ den Operator, der $u(x)$ in $u(-x)$ überführt:

$$\mathbf{\Pi} : (\mathbf{\Pi}u)(x) = u(-x)$$

Eigenzustände

Es gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}u^{(+)}(x) &= u^{(+)}(-x) = u^{(+)}(x), \\ \mathbf{\Pi}u^{(-)}(x) &= u^{(-)}(-x) = -u^{(-)}(x), \end{aligned}$$

d.h. die $u^{(+)}$ sind Eigenlösungen von $\mathbf{\Pi}$ zum Eigenwert +1, die $u^{(-)}$ Eigenfunktionen von $\mathbf{\Pi}$ zum Eigenwert -1. Die Eigenwerte ± 1 sind hier auch die einzig möglichen, da zweimalige Anwendung von $\mathbf{\Pi}$ zur ursprünglichen Funktion zurückführt:

Aus $(\mathbf{\Pi}u)(x) = \lambda u(x)$ folgt:

$$u(x) = \mathbf{\Pi}(\mathbf{\Pi}u) \equiv \mathbf{\Pi}^2u = \lambda\mathbf{\Pi}u = \lambda^2u(x), \quad \text{d.h.} \quad \lambda = \pm 1.$$

Die Eigenwerte $\lambda = \pm 1$ heißen *Paritäten*.

Zerlegung

Man kann jede Funktion $u(x)$ nach Eigenfunktionen von $\mathbf{\Pi}$ zerlegen :

$$u(x) = \frac{1}{2}(u(x) + u(-x)) + \frac{1}{2}(u(x) - u(-x)).$$

Symmetrien

Der Hamilton-Operator eines Potentialtopfes, $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0$, für $|x| < a$, ist invariant gegenüber der Substitution $x \rightarrow -x$, d.h. wir haben

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{H}\Psi(x, t)) = \mathbf{H}(\mathbf{\Pi}\Psi(x, t))$$

Man bezeichnet allg. einen Operator Π , welcher mit dem Hamilton-Operator vertauscht, als eine *Symmetrie*. Für den Paritätsoperator ist dies der Fall:

$$\Pi \mathbf{H} - \mathbf{H} \Pi = [\Pi, \mathbf{H}] = 0 .$$

Invarianz der Eigenfunktionen

Ist $\Psi(x, t)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = \mathbf{H} \Psi(x, t) ,$$

so erhält man durch Anwendung von Π auf beiden Seiten

$$i\hbar \partial_t (\Pi \Psi) = \Pi (\mathbf{H} \Psi) = \mathbf{H} (\Pi \Psi)$$

wobei wir im letzten Schritt die Vertauschungrelation $\Pi \mathbf{H} = \mathbf{H} \Pi$ verwendet haben. Falls $\mathbf{H}$ mit der Symmetrie Π vertauscht, dann ist mit Ψ somit auch $\Pi \Psi$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Die symmetrisierten (antisymmetrisierten) Funktionen

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}(x, t) &= \frac{1}{2}(1 + \Pi)\Psi(x, t) , \\ \Psi^{(-)}(x, t) &= \frac{1}{2}(1 - \Pi)\Psi(x, t) . \end{aligned}$$

$\Psi^{(\pm)}(x, t)$ genügen also jede für sich der Schrödinger-Gleichung und werden im Laufe der Zeit nicht gemischt. Hieraus folgt direkt, daß jede Eigenfunktion $u(x)$ der stationären Schrödinger-Gleichung nach den Eigenwerten von Π klassifiziert werden kann. Sie muss also gerade oder ungerade in x sein.

Eigenschaften des Paritätsoperators

Für die Orts- und Impulsoperatoren $\mathbf{Q}$ und $\mathbf{P}$ gilt offenbar

$$\Pi \mathbf{Q} = -\mathbf{Q} \Pi , \quad \Pi \mathbf{P} = -\mathbf{P} \Pi .$$

Der Paritätsoperator ist hermitisch, $\Pi^\dagger = \Pi$. Es gilt

$$(u_1, \Pi u_2) = \int_{-a}^{+a} dx u_1^*(x) u_2(-x) .$$

Die Substitution $x \rightarrow -x$ unter dem Integral ergibt

$$(u_1, \Pi u_2) = \int_{-a}^{+a} dx u_1^*(-x) u_2(x) = (\Pi u_1, u_2) = (u_2, \Pi u_1)^* ,$$

Q.E.D.

2.7 Zusammenfassung

Die Betrachtung der Quantenmechanik eindimensionaler Systeme erscheint auf den ersten Blick etwas akademisch. Aus zwei Gründen ist dieses Kapitel jedoch sehr wichtig. Einerseits gibt es gerade durch die moderne Halbleitertechnik physikalische Systeme (Quantendrähte, Quantendots), welche sich eindimensional verhalten und durch die hier entwickelte Theorie in erster Näherung beschrieben werden. Zudem konnten wir anhand der eindimensionalen Systeme einiges von allg. Bedeutung lernen:

1. Die Existenz und Physik von Streuzuständen (Potentialstufe und Potentialbarriere). Sie haben ein *kontinuierliches* Energiespektrum.
2. Die Physik des Tunneleffekts (Potentialbarriere). Als Funktion des Tunnelpotentials ist die Tunnelrate i.a. exponentiell klein.
3. Die Eigenschaften der Eigenzustände in einem Potential $V(x)$, welches für $|x| \rightarrow \infty$ divergiert (unendlich tiefer Potentialtopf): Alle Eigenenergien sind *diskret* und durch die Randbedingungen bestimmt. Ein weiteres Beispiel hierzu werden wir später mit dem harmonischen Oszillator kennenlernen.
4. Die Existenz von gebundenen Zuständen für ein Potential $V(x)$, welches für $|x| \rightarrow \infty$ endlich bleibt (endlich tiefer Potentialtopf). Die Randbedingungen bestimmen die erlaubten Quantenzahlen. Gebundene Zustände werden wir beim Wasserstoffatom wiedersehen, die Lösung der Schrödinger-Gleichung erfordert im Falle des Wasserstoffatoms jedoch einen viel höheren mathematischen Aufwand.
5. Am Beispiel des Paritätsoperators haben wir gesehen, daß sich die Lösungen eines Hamiltonoperators nach den Eigenwerten seiner Symmetrieelemente klassifizieren lassen. Von diesem Umstand werden wir bei der Betrachtung des Wasserstoffatoms umfassenden Gebrauch machen.