# Kapitel 3

# Eindimensionale Systeme

## 3.1 Die 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

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

suchen (Separation der Variablen):

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

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

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

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.

$$\boxed{\sigma(t) \;=\; C\,e^{-i\,Et/\hbar}, \qquad C = \text{const.}}$$

und

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

Dies ist die zeitunabhängige oder die *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

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

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

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

*Eigenfunktion* des Schrödinger–Operators $\mathbf{H}$ zum Eigenwert $E$.

**Überlagerung zweier Lösungen**

Seien

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

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

$$i\hbar\, \partial_t \psi(\vec{x}, t) \;=\; \mathbf{H}\, \psi(\vec{x}, t)\ ,$$

so ist auch ihre Summe $\psi_1(\vec{x}, t) + \psi_2(\vec{x}, t)$ eine Lösung.

**Eigenwert-Spektren**

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

$$\begin{array}{rl} -\infty \;<\; E_1,\ \ldots,\ E_\nu,\ \ldots & \qquad \textit{diskrete}\ \text{Eigenwerte}, \\ \{ -\infty \;<\; E \;<\; \infty \} & \qquad \textit{kontinuierlich}\ \text{verteilte Eigenwerte}. \end{array}$$

Wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung sind beliebige Überlagerungen

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

der orthonomierten 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

$$\sum_\nu |C_\nu|^2 + \int dE\, |C(E)|^2 \;=\; 1$$

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

**Eigenfunktionen des Impulsoperators**

Als einfaches Beispiel betrachten wir die Eigenfunktionen $e_p(x)$ des Impulsoperators $\mathbf{P} = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{dx}$ 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 $e_p(x) = Ce^{ipx/\hbar}$, $C = const.$, also ebene Wellen.

## 3.2 Die eindimensionale Potentialstufe

Wir betrachten hier das eindimensionale Potential

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

Die zugehörige zeitunabhängige Schrödinger–Gleichung zum Eigenwerte $E$ lautet

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

**Randbedingungen**

Aus

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

folgt, daß bei stetigem $u(x)$ die 2. Ableitung von $u$ (linke Seite) bei $x=0$ einen endlichen Sprung um $2m\,V_0/\hbar^2 u(0)$ macht. $\frac{du}{dx}$ ist dagegen noch stetig:

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

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

Die *Randbedingung* sind also: $u(x)$, $\frac{du}{dx}$ sind stetig für $x=0$.

### 3.2.1 Streuzustände

Wir betrachten $E > V_0$, d.h. die Eigenenergie des Zustandes ist größer als die Potentialstufe. Klassisch würde das Elektron also einfach durchlaufen.

**Einlaufende und reflektierte Welle**

Für $x < 0$ ergibt sich, abgesehen von einer Konstanten, die allgemeine Lösung:

$$\boxed{x < 0: \quad u(x) \;=\; e^{ikx} + Re^{-ikx}, \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} > 0, \qquad R = \text{const.}\,.}$$

Der zugehörige Teilchenfluß (Wahrscheinlichkeits - Stromdichte) ist

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

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

**Transmitierte Welle**
Die Lösung für $x > 0$ lautet

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

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

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

**Stetigkeitsbedingungen**
$u(x)$ ist bei $x = 0$ stetig, falls

$$1 + R \;=\; T$$

und $\dfrac{du}{dx}$ ist bei $x = 0$ stetig, falls

$$ik\,(1 - R) \;=\; iq\,T\;.$$

Aus beiden Gleichungen folgt

$$\boxed{R \;=\; \frac{k-q}{k+q}\,, \qquad T \;=\; \frac{2k}{k+q}\;.}$$

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

**Teilchenstromerhaltung**
Man rechnet unmittelbar nach, daß

$$\frac{\hbar k}{m}\left(1 - |R|^2\right) \;=\; \frac{\hbar q}{m}\,|T|^2\;.$$

$s(x)$ ist also ebenfalls bei $x = 0$ stetig, der Teilchenstrom ist aufgrund der Kontinuitätsgleichung erhalten.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik, innerhalb welcher für $E > V_0$ kein Teilchen an der Potentialstufe reflektiert würde, wird in der Quantenmechanik der endliche Bruchteil $|R|^2$ des Elektrons reflektiert. Für $V_0 \ll E$ gilt $q \to k$

### 3.2.2 Reflektierte Zustände

Wir betrachten nun $E < V_0$. Für $x < 0$ ist die allgemeie Lösung durch

$$\boxed{\begin{aligned} u(x) &= A_1 \sin kx + B_1 \cos kx \;, \\ & k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \;, \end{aligned}}$$

gegeben und für $x > 0$ durch

$$\boxed{\begin{aligned} u(x) &= A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x} \;, \\ & \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \;. \end{aligned}}$$

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 $u(x)$ für $x = 0$ ergibt

$$A_2 = B_1 \;,$$

die Stetigkeit von $\frac{du}{dx}$ in $x = 0$ führt auf

$$A_1 k = -A_2 \kappa \;.$$

Mit diesen beiden Gleichungen erhält man

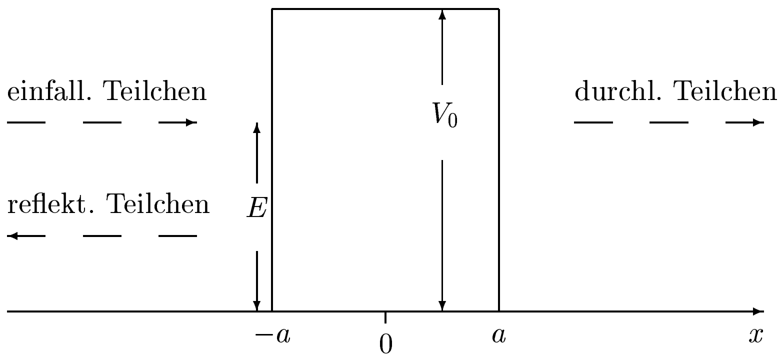
$$\boxed{\begin{aligned} x < 0: \qquad u(x) &= A_1 \left( \sin kx - \frac{k}{\kappa} \cos kx \right) \;, \\ x > 0: \qquad u(x) &= -A_1 \frac{k}{\kappa} e^{-\kappa x} \;. \end{aligned}}$$

**Bemerkungen**

1. Es ist überall $s(x) = 0$ (stehende Wellen!).

2. Man hat $w(x) = |A_1|^2 \, \frac{k^2}{\kappa^2} \, e^{-2\kappa x}$ für $x > 0$, d.h. im Gegensatz zum klassischen Fall dringt ein Bruchteil der Teilchen auch in das Gebiet $x > 0$ ein.

## 3.3 Die Potentialbarriere




Das Potential ist:

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

**Wellenfunktion**

Wir nehmen an, dass von links Teilchen mit der Energie $E < V_0$ einfallen , von denen ein Teil reflektiert wird. 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 $\frac{du}{dx}$ in $x = \pm a$ führ auf folgendes lineare Gleichungssystem für die vier Größen $R$, $A$, $B$ und $T$:

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

$$x = +a \quad : \quad \begin{cases} Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} = Te^{ika} \\ \kappa\left(-Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a}\right) = ikTe^{ika}\,. \end{cases}$$

Aus den beiden ersten Gleichungen ergibt sich durch Addition und Subtraktion:

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

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 ergeben

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

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

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

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

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

Analog findet man

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

Daraus bekommt man folgende Absolutquadrate:

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

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.

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

d.h.

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

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

**Allgemeine Tunnelbarriere**

Berücksichtigt man in obiger Formel in erster Näherung nur die Exponentialfunktion, so sind die Transmissionskoeffizienten *näherungsweise* multiplikativ, d.h., falls $a = a_1 + a_2$, dann gilt für die zugehörigen Transmissionskoeffizienten

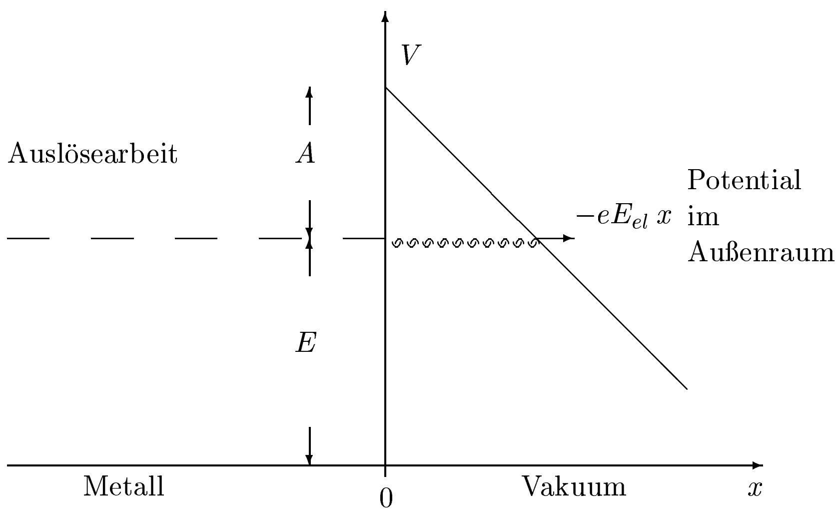
$$|T_a|^2 \;\approx\; |T_{a_1}|^2 \cdot |T_{a_2}|^2$$

(Multiplikationssatz der Wahrscheinlichkeiten).

Approximiert man nun einen kontinuierlichen Potentialberg $V(x)$ durch Stufen der Dicke $\Delta x = 2a$, so ist die totale Tunnelwahrscheinlichkeit in dieser Näherung durch das Produkt der einzelnen Tunnelwahrscheinlichkeiten gegeben und somit - abgesehen von einem Normierungsfaktor - durch

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

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



## 3.4 Der unendlich tiefe Potentialtopf

Wir studieren hier den Potentialverlauf

$$\boxed{\begin{array}{rclll} V(x) & = & 0 & \text{für} & -a < x < a\,, \\ V(x) & = & \infty & \text{sonst}\,. & \end{array}}$$

In Kap. 3.2 haben wir gesehen, daß die Wellenfunktion mit Energie $E < V_0$ in der Potentialstufe exponentiell unterdrückt wird. Für $V_0 \to \infty$ folgt also, dass für den unendlich tiefen Potentialtopf $u(x) = 0$ für $|x| \geq a$ gilt. Im Topf selbst hat man

$$\frac{d^2u}{d\,x^2} = -\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\,u\,.$$

**Keine Lösungen für $E < 0$**

Falls $E < 0$, $\kappa = \frac{1}{\hbar}(-2mE)^{\frac{1}{2}}$, so hat man für $-a < x < a$ die Lösungen

$$u(x) = A_1 e^{\kappa x} + A_2 e^{-\kappa x}\;,$$

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 $E > 0$ hat man für $-a < x < a$

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

mit den Lösungen

$$\begin{array}{rcl} u^{(-)}(x) & = & A^{(-)}\sin kx\;, \\ u^{(+)}(x) & = & A^{(+)}\cos kx\;, \\ (-) & : & \text{ungerade Funktion in } x, \\ (+) & : & \text{gerade Funktion in } x. \end{array}$$

**Antisymmetrische Lösung**

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

Die zulässigen Energiewerte sind

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} u_n^{(-)}(x) &= a^{-\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) , \\ & n = 1, 2, 3, \cdots . \end{aligned}}$$

**Symmetrische Lösung**

Für die gerade (symmetrische) Lösung folgt aus $\cos ka = 0$, daß hier $ka = (n+1/2)\pi,\ n = 0, 1, 2, \cdots$ sein muß, und damit lauten die Eigenwerte

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

Die zugehörigen (normierten) Eigenfunktionen sind:

$$\boxed{\begin{aligned} u_n^{(+)} &= a^{-\frac{1}{2}} \cos\left[(n+1/2)\frac{\pi x}{a}\right] , \\ & n = 0, 1, 2, \cdots . \end{aligned}}$$

**Grundzustandsenergie**

Der tiefstmögliche Energiewert - die *Grundzustandsenergie* - ist

$$\boxed{E_0^{(+)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} .}$$

$E = 0$ ist nicht möglich, da dann die Lösung $u(x) = b_1\, x + b_0$ den Randbedingungen nur genügt, wenn $b_0 = 0,\ b_1 = 0$.

**Knoten der Wellenfunktion**

Die Energien $E_n^{(\pm)}$ sind um so größer, je größer die Zahl der Nullstellen (*Knoten*) der zugehörigen Eigenfunktionen $u_n^{(\pm)}(x)$ im Intervall $[-a, +a]$ ist. $E_n$ ist umso größer, je schneller sich $u(x)$ mit $x$ ändert.

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

**Orthogonalität**

Mittels der Beziehungen

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

rechnet man leicht nach, daß

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

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

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

zueinander orthogonal:

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

**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

$$(\Delta x)^2 \ = \ \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 \ = \ \left\langle x^2 \right\rangle, \qquad (\Delta p)^2 \ = \ \left\langle p^2 \right\rangle - \langle p \rangle^2 \ = \ \left\langle p^2 \right\rangle \ .$$

**Impulsunschärfe**

Aus $\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \dfrac{d^2}{dx^2} = 2m\mathbf{H}$ folgt

$$\begin{aligned} \left\langle p^2 \right\rangle_n^{(\pm)} \ &= \ 2mE_n^{(\pm)} \ , \qquad \text{wobei} \\ \left\langle p^2 \right\rangle_n^{(\pm)} \ &= \ \int_{-a}^{a} dx\, u_n^{(\pm)}(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) u_n^{(\pm)}(x) \ . \end{aligned}$$

**Ortsunschärfe**

Ferner erhalten wir für $\langle x^2 \rangle$, mit der Substitution $y = \pi x/a$

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

Da $\sin^2\alpha = \frac{1}{2}(1-\cos 2\alpha)$ erhält man nach mehrmaliger partieller Integration

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

**Orts- und Impulsunschärfe**

Das Gesamtergebnis für die ungeraden Eigenfunktionen lautet also:

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

Analog erhält man für die ungeraden Wellenfunktionen, mit $\cos^2\alpha = \frac{1}{2}(1+\cos 2\alpha)$:

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

**Unschärferelationen**

Die Unschärferelationen lauten:

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

**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

$$\boxed{(\Delta x)_0^{(+)} \cdot (\Delta p)_0^{(+)} \ = \ \frac{\hbar}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{4}\pi^2 - \frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \ = \ 0{,}568\,\hbar \ > \ \frac{\hbar}{2} \ ,}$$

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

## 3.5 Der Potentialtopf mit endlicher Tiefe

Es sei

$$\boxed{\begin{aligned} V &= 0 & &\text{für } |x| > a \ , \\ V &= -V_0 \ , \quad V_0 > 0 \ , & &\text{für } |x| < a \ . \end{aligned}}$$

Die Lösungen zu positiver Energie bekommt man durch analytische Fortsetzung ($\kappa \to -i\kappa$) der Lösungen für die Potentialbarriere (s. Kap. 3.3).

**Gebundene Zustände**
Die Lösungen zu negativen Energien,

$$0 \;>\; E \;>\; -V_0 \;,$$

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

$$\boxed{\begin{array}{rrl} x < -a \;: & u(x) & = B_- \, e^{\kappa x} \;, \quad \kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar \\ -a < x < +a \;: & u(x) & = A_1 \cos qx + A_2 \sin qx \;, \\ & q & = \sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar \quad , \\ x > a \;: & u(x) & = B_+ e^{-\kappa x} \,. \end{array}}$$

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

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

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 zerfallen wieder in symmetrische und antisymmetrische

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

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

**Eigenwertgleichungen**
Die Gleichungen

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

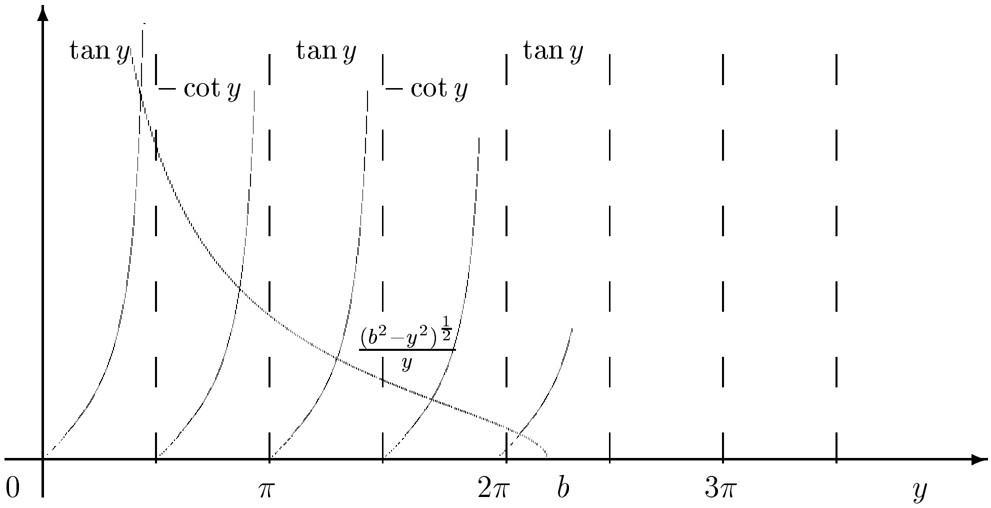
bestimmen die zulässigen Eigenwerte $E^{(+)}$, $E^{(-)}$. Mit $b^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$, $y^{(\pm)} = aq^{(\pm)}$, finden wir

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

Die transzendenten Gleichungen

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

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




Die Anzahl der gebundenen Zustände hängt von dem Wert von $b^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$ ab:

**Symmetrische gebundene Zustände**

Wie klein auch $b^2$, es gibt immer einen (symmetrischen) gebundenen Zustand für $0 < y^{(+)} < \frac{\pi}{2}$. Dieses Resultat gilt ist nur für den hier betrachteten Fall eines 1-dimensionalen Potentialtopfes der Fall und gilt nicht in 3 Dimensionen.

**Antisymmetrische gebundene Zustände**

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

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

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

## 3.6 Der Paritätsoperator

Beim Potentialtopf zerfallen die Eigenlösungen von $\mathbf{H}$ in symmetrische und antisymmetrische. Dies legt die folgende Definition nahe:
Es sei $\mathbf{\Pi}$ der Operator, der $u(x)$ in $u(-x)$ überführt:

$$\boxed{\mathbf{\Pi}\ :\quad (\mathbf{\Pi}u)(x)\ =\ u(-x)\,.}$$

Man nennt $\mathbf{\Pi}$ "Spiegelungs"- oder auch "Paritäts"-Operator.

**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 $\pm 1$ 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:

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

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

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

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

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

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

Man bezeichnet allg. einen Operator $\mathbf{\Pi}$, welcher mit dem Hamilton–Operator vertauscht, als ein *Symmetrieelement.* Für den Paritätsopertor ist dies der Fall:

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

**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 $\mathbf{\Pi}$ auf beiden Seiten

$$\boxed{i\hbar\partial_t \left(\mathbf{\Pi}\Psi\right) \;=\; \mathbf{\Pi}(\mathbf{H}\Psi) \;=\; \mathbf{H}(\mathbf{\Pi}\Psi) \, .}$$

Falls $\mathbf{H}$ mit dem Symmetrieelement $\mathbf{\Pi}$ vertauscht, dann ist mit $\Psi$ auch $\mathbf{\Pi}\Psi$ eine Lösung der Schrödinger–Gleichung. Die symmetrisierten (antisymmetrisierten) Funktionen

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

$\Psi^{(\pm)}(x,t)$ 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 $\mathbf{\Pi}$ 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

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

Der Paritätsoperator ist hermitisch: Es gilt

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

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

$$(u_1, \mathbf{\Pi}u_2) \;=\; \int_{-a}^{+a} dx\, u_1^*(-x) u_2(x) \;=\; (\mathbf{\Pi}u_1, u_2) \;=\; (u2, \mathbf{\Pi}u_1)^* \;.$$

## 3.7 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 es gerade durch die moderne Halbleitertechnik physikalische System (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). Die Tunnelrate ist i.a. exponentiell (im Tunnelpotential) klein.

3. Die Eigenschaften der Eigenzustände in einem Potential $V(x)$ , welches für $|x| \to \infty$ divergiert (unendlich tiefer Potentialtopf): Alle Eigenenergien sind *diskret* und durch die Randbedingungen bestimmt. Ein weiteres Beispiel hierzu werden wir später mit dem harmonischen Oszillator kennelernen.

4. Die Existenz von gebundenen Zuständen für ein Potential $V(x)$ , welches für $|x| \to \infty$ endlich bleibt (endlich tiefer Potentialtopf). Die Randbedingungen bestimmen die erlaubten Quantenzahlen. Gebundene Zustände werden wir beim Wasserstoffatoms 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.