

# KAPITEL IV

## Wellenmechanik: Beispiele in einer Raumdimension

stationäre eindimensionale Schrödinger-Gleichung

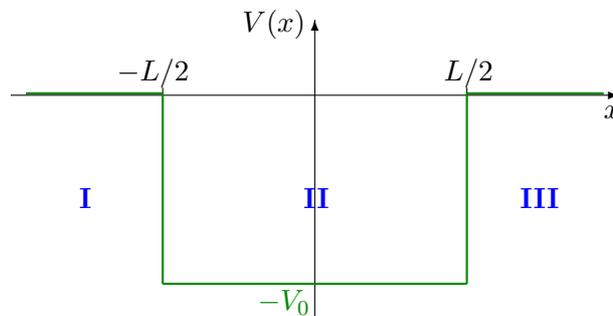
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (\text{IV.1})$$

### IV.1 Teilchen in einem endlichen Kastenpotential

Als erstes Beispiel betrachten wir die Bewegung eines Teilchens in Anwesenheit des in Abb. IV.1 dargestellten (rechteckigen) „Kastenpotentials“

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } |x| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{IV.2})$$

mit  $V_0 > 0$ .



**Abbildung IV.1** – Darstellung des Kastenpotentials (IV.2).

Im Rahmen der klassischen Mechanik sind alle Werte der Gesamtenergie des Teilchens  $E > -V_0$  erlaubt. Dazu kann sich das Teilchen für  $-V_0 < E < 0$  nur im Gebiet II ( $|x| \leq L/2$ ) befinden, während es sich für  $E \geq 0$  überall bewegen kann; insbesondere kann es dann problemlos über den Potentialtopf „springen“.

Wir werden hiernach finden, dass die Resultate des quantenmechanischen Problems für  $E < 0$  ganz unterschiedlich sind (Abschn. IV.1.1), und dass es auch für  $E \geq 0$  einige Unterschiede gibt (Abschn. IV.1.2). In beiden Fällen wird die Strategie zur Bestimmung der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung (IV.1) auf  $\mathbb{R}$  gleich sein: erstens werden Lösungen der Differentialgleichung in jedem der drei Bereichen I, II und III gesucht; dann werden diese Lösungen durch passende *Anschlussbedingungen* bei  $x = -L/2$  und  $x = L/2$  an einander geklebt.

### IV.1.1 Gebundene Zustände

In diesem Abschnitt werden die gebundenen Zustände des Kastenpotentials gesucht, d.h. die normierbaren Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung (IV.1) mit dem Potential (IV.2) mit negativer Energie  $E < 0$ .

Um spätere Ausdrücken zu vereinfachen, definiert man eine reelle Zahl  $\kappa$  durch

$$E \equiv -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad \text{mit } \kappa > 0. \quad (\text{IV.3})$$

In Übereinstimmung mit der oben skizzierten Strategie werden zunächst Lösungen von Gl. (IV.1) in den verschiedenen Gebieten gesucht.

- Im Gebiet I nimmt die stationäre Schrödinger-Gleichung mit dem Kastenpotential (IV.2), das dort einfach Null ist, die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = E \psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = \kappa^2 \psi_E(x)$$

an. Die allgemeine Lösung dieser linearen Differentialgleichung zweiter Ordnung ist eine beliebige Linearkombination der (linear unabhängigen) Lösungen  $e^{\kappa x}$  und  $e^{-\kappa x}$ :

$$\psi_E(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} \quad \text{mit } A, B \in \mathbb{C} \quad \text{für } x < -\frac{L}{2}.$$

Damit die Lösung normierbar, d.h. quadratintegrierbar, ist, darf sie für  $x \rightarrow -\infty$  nicht divergieren. Daher soll der Koeffizient  $B$  verschwinden. Es bleibt also

$$\psi_E(x) = A e^{\kappa x} \quad \text{mit } A \in \mathbb{C} \quad \text{für } x < -\frac{L}{2}. \quad (\text{IV.4})$$

- Im Gebiet III vereinfacht sich wieder die stationäre Schrödinger-Gleichung zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = E \psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = \kappa^2 \psi_E(x),$$

wie im Bereich I, was zur allgemeinen Lösung

$$\psi_E(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x} \quad \text{mit } C, D \in \mathbb{C} \quad \text{für } x > \frac{L}{2}$$

führt. Um die Normierbarkeit dieser Lösung sicherzustellen, darf sie im Limes  $x \rightarrow \infty$  nicht divergieren, d.h. der Koeffizient  $C$  soll Null sein. Somit gilt

$$\psi_E(x) = D e^{-\kappa x} \quad \text{mit } D \in \mathbb{C} \quad \text{für } x > \frac{L}{2}. \quad (\text{IV.5})$$

- Im Gebiet II lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} - V_0 \psi_E(x) = E \psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = -\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \psi_E(x).$$

Für  $E > -V_0$  ist  $E + V_0 > 0$ : sei  $k > 0$  derart, dass

$$E + V_0 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{mit } k > 0 \quad (\text{IV.6})$$

gilt. Dann wird die Differentialgleichung zu

$$\frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = -k^2 \psi_E(x)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi_E(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \quad \text{mit } F, G \in \mathbb{C} \quad \text{für } -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}. \quad (\text{IV.7})$$

Nun gilt es, aus den partiellen Lösungen (IV.4), (IV.5) und (IV.7) eine Lösung  $\psi_E$  der stationären Schrödinger-Gleichung auf  $\mathbb{R}$  zu basteln. Da das Potential überall endlich bleibt, und stückweise stetig ist, sollte  $\psi_E$  kontinuierlich differenzierbar auf  $\mathbb{R}$ , d.h. insbesondere in den Punkten  $x = -L/2$  und  $x = L/2$ , sein.

Ad Absurdum: Ist  $\psi_E$  in einem Punkt  $x_0$  unstetig, so ist die erste Ableitung  $\psi'_E(x_0)$  proportional zu  $\delta(x - x_0)$  und die zweite Ableitung  $\psi''_E$  enthält  $\delta'(x - x_0)$ . Dieser Beitrag in  $\delta'(x - x_0)$  wird in der stationären Schrödinger-Gleichung durch keinen anderen solchen Term kompensiert, was nicht möglich ist.

Ähnlich, wenn  $\psi'_E$  in einem Punkt  $x_0$  unstetig ist, so enthält die zweite Ableitung  $\psi''_E(x_0)$  einen Term proportional zu  $\delta(x - x_0)$ , der durch keinen anderen Term in der Schrödinger-Gleichung kompensiert werden kann, was wieder unmöglich ist.

Somit gelten die vier Anschlussbedingungen

$$\bullet \psi_E\left(-\frac{L^-}{2}\right) = \psi_E\left(-\frac{L^+}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad A e^{-\kappa L/2} = F e^{-ikL/2} + G e^{ikL/2} \quad (\text{IV.8a})$$

$$\bullet \psi'_E\left(-\frac{L^-}{2}\right) = \psi'_E\left(-\frac{L^+}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad A \kappa e^{-\kappa L/2} = ik(F e^{-ikL/2} - G e^{ikL/2}) \quad (\text{IV.8b})$$

$$\bullet \psi_E\left(\frac{L^+}{2}\right) = \psi_E\left(\frac{L^-}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad D e^{-\kappa L/2} = F e^{ikL/2} + G e^{-ikL/2} \quad (\text{IV.8c})$$

$$\bullet \psi'_E\left(\frac{L^+}{2}\right) = \psi'_E\left(\frac{L^-}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad D \kappa e^{-\kappa L/2} = ik(F e^{ikL/2} - G e^{-ikL/2}). \quad (\text{IV.8d})$$

Dabei bezeichnet  $f(x_0^-)$  bzw.  $f(x_0^+)$  den links- bzw. rechtsseitigen Grenzwert einer Funktion  $f$  (hier  $\psi_E$  oder  $\psi'_E$ ) im Punkt  $x_0$  (hier  $-L/2$  oder  $L/2$ ).

Die weiteren Berechnungen können unter Nutzung von Symmetriebetrachtungen vereinfacht werden. Da das Potential (IV.2) eine gerade Funktion von  $x$  ist, wird für jede Eigenfunktion  $\psi_E(x)$ , die die stationäre Schrödinger-Gleichung (IV.1) mit einem bestimmten Wert von  $E$  löst, die Funktion  $\chi_E(x) \equiv \psi_E(-x)$  auch Lösung von Gl. (IV.1) für die gleiche Energie  $E$  sein.

Aus  $\chi_E(x) \equiv \psi_E(-x)$  folgt nämlich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_E(x)}{dx^2} + V(x) \chi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(-x)}{d(-x)^2} + V(-x) \psi_E(-x) = E \psi_E(-x) = E \chi_E(x). \quad \square$$

Wegen der Linearität sind dann

$$\psi_E^{(S)}(x) \equiv \psi_E(x) + \psi_E(-x) \quad \text{und} \quad \psi_E^{(A)}(x) \equiv \psi_E(x) - \psi_E(-x) \quad (\text{IV.9})$$

auch Eigenfunktionen des Problems für den gleichen Energiewert  $E$ . Das Schöne an  $\psi_E^{(S)}$  und  $\psi_E^{(A)}$  ist aber, dass sie gewisse „Symmetrien“ besitzen: in der Tat ist  $\psi_E^{(S)}$  bzw. symmetrisch,<sup>(15)</sup> während  $\psi_E^{(A)}$  ungerade bzw. antisymmetrisch<sup>(15)</sup> ist. Demzufolge wird hiernach nach solchen symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen gesucht.

**Bemerkung:** Das eben gefundene Ergebnis sollte nicht falsch interpretiert werden. Es bedeutet nicht, dass es für jeden Energiewert zwei linear unabhängige Eigenfunktionen, eine gerade und eine ungerade, gibt: eine dieser Funktionen darf nämlich identisch Null sein — wir werden hiernach sehen, dass dies im Kastenpotential immer der Fall ist! —, und stellt damit keine gültige Wellenfunktion dar.

Bei geraden oder ungeraden Eigenfunktionen gelten bestimmte Beziehungen zwischen den Koeffizienten der Gl. (IV.4), (IV.5) und (IV.7).

<sup>(15)</sup>implizit: unter dem Austausch von  $x$  und  $-x$ , d.h. unter der Transformation  $x \rightarrow -x$ .

- Für symmetrische Lösungen sollen  $A = D$  und  $F = G$  sein. Dann sind die Bedingungen (IV.8a) und (IV.8c) einerseits, (IV.8b) und (IV.8d) andererseits äquivalent, und es bleibt

$$\begin{cases} A e^{-\kappa L/2} = 2F \cos \frac{kL}{2} \\ A\kappa e^{-\kappa L/2} = 2kF \sin \frac{kL}{2} \end{cases} \quad (\text{IV.10a})$$

übrig: daraus folgt nach Division ( $A$  und  $F$  müssen ungleich Null sein, um eine normierbare Lösung zu definieren) die Beziehung

$$\kappa = k \tan \frac{kL}{2} \quad (\text{IV.10b})$$

zwischen  $\kappa$  und  $k$ .

- Für eine antisymmetrische Lösung gelten  $A = -D$  und  $F = -G$ . Dann vereinfachen sich die Anschlussbedingungen (IV.8) zu

$$\begin{cases} A e^{-\kappa L/2} = -2iF \sin \frac{kL}{2} \\ A\kappa e^{-\kappa L/2} = 2ikF \cos \frac{kL}{2}, \end{cases} \quad (\text{IV.11a})$$

entsprechend zwischen  $\kappa$  und  $k$  der Beziehung

$$\kappa = -k \cot \frac{kL}{2}. \quad (\text{IV.11b})$$

Neben dem Zusammenhang zwischen  $\kappa$  und  $k$ , der aus der geforderten Symmetrie oder Antisymmetrie der Wellenfunktion folgt, führen deren Definitionen (IV.3), (IV.6) zu einer zweiten Beziehung

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

d.h. noch

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}, \quad (\text{IV.12})$$

die sowohl für symmetrische als auch für antisymmetrische Eigenfunktionen gilt. Somit sind die möglichen Werte von  $k$  die Lösungen von

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1} = \begin{cases} \tan \frac{kL}{2} & \text{für eine symmetrische Eigenfunktion} \\ -\cot \frac{kL}{2} & \text{für eine antisymmetrische Eigenfunktion.} \end{cases} \quad (\text{IV.13})$$

Die Lösung dieser transzendenten Gleichungen wird graphisch in Abb. IV.2 dargestellt. Die somit gefundenen Werte von  $k$  bilden eine diskrete Menge  $\{k^{(n)}\}$ , die über Gl. (IV.6) einem ebenfalls diskreten Energiespektrum  $\{E^{(n)}\}$  entsprechen, im Gegensatz zum analogen klassischen Problem.

Sei  $k_{\max} \equiv \sqrt{2mV_0}/\hbar$  der Wert von  $k$ , für den der Term auf der linken Seite der Gl. (IV.13) Null wird. Egal wie groß  $k_{\max}$  ist, werden die Funktionen  $\sqrt{2mV_0/\hbar^2 k^2 - 1} \equiv f(k)$ , die monoton abnimmt, und  $\tan(kL/2)$ , die für  $0 \leq k < \pi/L$  monoton von 0 bis  $+\infty$  wächst, für einen Wert  $k^{(1)}$  gleich sein. Das heißt, dass es unabhängig von den Werten der Parameter  $m$  und  $V_0$  immer einen gebundenen Zustand gibt. Dieser Zustand minimaler Energie wird *Grundzustand* genannt. Da  $k^{(1)}$  einem Schnittpunkt von  $f(k)$  und  $\tan \frac{kL}{2}$  entspricht, ist die Eigenfunktion  $\psi^{(1)}(x)$  zur Energie  $E^{(1)}$  symmetrisch. Genauer gilt laut Gl. (IV.7) mit  $F = G$  und Gl. (IV.4), (IV.5) mit  $A = D$

$$\psi^{(1)}(x) = \begin{cases} 2F \cos(k^{(1)}x) & \text{für } -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ A e^{-\kappa^{(1)}|x|} = 2F \cos \frac{k^{(1)}L}{2} \exp\left[-k^{(1)}\left(|x| - \frac{L}{2}\right) \tan \frac{k^{(1)}L}{2}\right] & \text{für } |x| \geq \frac{L}{2}, \end{cases}$$

wobei der zweite Ausdruck für den Fall  $|x| \geq \frac{L}{2}$  aus den Beziehungen (IV.10b) zwischen  $\kappa$  und  $k$  und (IV.10a) zwischen  $A$  und  $F$  folgt. Da  $k^{(1)} < \pi/L$  ist, hat diese Eigenfunktion des Grundzustands keine Nullstelle.

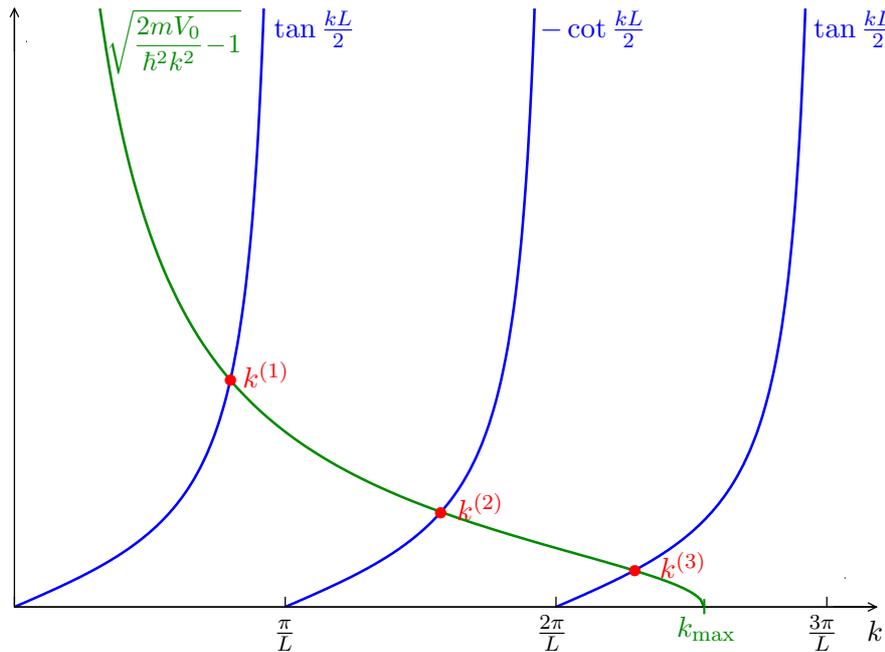


Abbildung IV.2 – Graphische Lösung der Gl. (IV.13).

**Bemerkung:** Ausgehend vom expliziten Ausdruck der Eigenfunktion  $\psi^{(1)}(x)$  könnte man jetzt deren Integral über  $\mathbb{R}$  berechnen, gleich 1 setzen, und somit die Normierungskonstante  $F$  bestimmen — was nicht wirklich erleuchtend wäre.

Allgemeiner gibt es nur endlich viele Lösungen für  $k$  — und zwar nur eine in jedem Intervall  $[n\frac{\pi}{L}, (n+1)\frac{\pi}{L}[$  für die nicht-negativen ganzen Zahlen  $n \leq k_{\max}L/\pi$  —, d.h. endlich viele erlaubte Energiewerte  $E^{(n)} < 0$ . Die Eigenfunktionen  $\psi^{(n)}$  der zugehörigen Bindungszustände sind abwechselnd symmetrisch und antisymmetrisch, und man prüft einfach nach, dass  $\psi^{(n)}(x)$  genau  $n - 1$  Nullstellen hat, die alle im Intervall  $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$  liegen.

Wichtig ist, dass alle Eigenfunktionen  $\psi^{(n)}$  nicht identisch Null (sogar nie Null) in den klassisch verbotenen Bereichen I und III sind — auch wenn sie dort nur „exponential klein“ sind. Das heißt, dass in jedem gebundenen Energie-Eigenzustand das Teilchen eine nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit in jenen Gebieten hat, was in der klassischen Physik nicht erlaubt ist.