Felix Rucker

Ferienkurs Quantenmechanik

Eindimensionale Probleme

1 Kurze Fragen

a) Geben Sie die Definition von Auf- und Absteigeoperator an und drücken Sie Orts- und Impulsoperator durch Auf- und Absteigeoperatoren aus.

Lösung:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}) \tag{1}$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}) \tag{2}$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) \tag{3}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{\hbar}}(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger}) \tag{4}$$

b) Wann bietet sich ein Separationsansatz für die Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ an?

Lösung: Ein Separationsansatz bietet sich immer bei einem zeitunabhängigen Hamilton-Operator $\hat{H}$ an.

c) Leiten Sie die stationäre Schrödingergleichung durch einen Separationsansatz aus der allgemeinen Schrödinger-Gleichung her.

Lösung: Wir machen einen Separationsansatz für die Wellenfunktion

$$\psi(x,t) = \psi(x)\chi(t) \tag{5}$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung erhalten wir:

$$-i\hbar\frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x) \tag{6}$$

Wir wissen, dass beide Seiten konstant sein müssen, da eine Variation der einen Seite keine Änderung der anderen hervorrufen kann. Wir nennen die Konstante E und können dann die stationäre Schrödingergleichung schreiben.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x) = E\psi(x) \tag{7}$$

d) Nennen Sie 3 Eigenschaften kohärenter Zustände.

Lösung:

(a) Sind Eigenzustände des Vernichtungsoperators $\hat{a}$.

(b) Sind normiert

(c) Es gilt $\langle x \rangle \neq 0$

e) Zeigen Sie: Wenn ψ_ν Eigenfunktion von $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ zum Eigenwert ν ist, so ist $\hat{a}^\dagger \psi_\nu$ Eigenfunktion von $\hat{n}$ mit Eigenwert $\nu + 1$.

Lösung: Es folgt aus

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{8}$$

ergibt sich:

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{9}$$

Es folgt also:

$$\hat{n}\hat{a}^\dagger \psi_\nu = (\hat{a}^\dagger \hat{n} + \hat{a}^\dagger)\psi_\nu = (\nu + 1)\psi \tag{10}$$

2 Potentialbarriere

Ein Teilchen der Masse m und kinetischer Energie $E < U$ trifft von links auf eine Potentialbarriere der Form

$$V(x) = \begin{cases} U > 0 & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{11}$$

a) Zeigen Sie, dass diese Situation durch eine Wellenfunktion der Form

$$\psi(x) \begin{cases} re^{-ikx} + e^{ikx} & \text{für } x < 0 \\ Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & \text{für } 0 < x < a \\ te^{ik(x-a)} & \text{für } x > a \end{cases} \tag{12}$$

dargestellt werden kann und bestimmen Sie k und κ als Funktion von m, E und U.

Lösung: Wir betrachten die einzelnen Abschnitte getrennt: Für $x < 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\psi(x) = E\psi(x) \tag{13}$$

Daher gilt: $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$
Für den Bereich $0 < x < a$ erhalten wir folgende Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U\right)\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\kappa + U\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{14}$$

und daraus folgt: $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$. Für den Bereich $x > a$ erhalten wir dasselbe Ergebnis wie für $x < 0$.

b) Zeigen Sie, dass

$$t = \frac{4ik\kappa}{(k+i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k-i\kappa)^2 e^{-\kappa a}} \tag{15}$$

gilt.

Lösung: Wir werten die vier Anschlussbedingungen für die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung aus:

$$x = 0 : \begin{cases} 1 + r = A + B \\ ik - i\kappa r = -\kappa A + \kappa B \end{cases} \tag{16}$$

$$x = a \begin{cases} Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} = t \\ -\kappa Ae^{-\kappa a} + \kappa Be^{\kappa a} = ikt \end{cases} \tag{17}$$

Aus den ersten beiden Gleichungen kann man r eliminieren, aus den letzen zwei t. Man erhält somit 2 Gleichungen für A und B:

$$(1 - qi)e^{-}\kappa aA + (1 + iq)e^{\kappa a}B = 0 \tag{18}$$

$$(1 + iq)A + (1 - iq)B = 2 \tag{19}$$

Dabei haben wir die Abkürzung $q = \kappa/k$ verwendet. Auflösen nach A und B liefert:

$$A = \frac{-2(1+iq)}{(1-iq)^2 e^{-2\kappa a} - (1+iq)^2} \tag{20}$$

$$B = \frac{2(1-iq)}{(1-iq)^2 - (1+iq)^2 e^{2\kappa a}} \tag{21}$$

Damit erhält man für t:

$$t = Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} = \frac{-4iq}{(1-iq)^2 e^{-\kappa a} - (1+iq)^2 e^{\kappa a}} \tag{22}$$

Erweitert man nun mit k^2 so erhält man das gewünschte Ergebnis.

c) Wie nennt man den sich hier andeutenden Effekt. Nennen Sie zwei Beispiele, wo dieser Effekt in Natur oder Technik auftritt.
Lösung: Es handelt sich um den Tunneleffekt. Er tritt z.B. beim α-Zerfall in der Kernphysik auf, bei Fusionsprozessen in der Sonne oder auch im Rastertunnelmikroskop.

3 Kohärente Zustände

Der Grundzustand $|0\rangle$ des linearen Harmonischen Oszillators wird durch die Gleichung $\hat{a}\,|0\rangle = 0$ definiert. Dieser Zustand wird durch den Weyl-Operator

$$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - \bar{z}\hat{a}) \tag{23}$$

in einen sogenannten kohärenten Zustand $|z\rangle = \hat{D}(z)\,|0\rangle$ transformiert, dabei ist $z \in \mathbb{C}$ eine beliebige komplexe Zahl.

a) Zeigen Sie, dass der unitäre Operator $\hat{D}(z)$ eine Verschiebung von $\hat{a}$ um z bewirkt, d.h. $\hat{D}^\dagger(z)\hat{a}\hat{D}(z) = \hat{a} + z$. Daher ist $|z\rangle$ ein Eigenzustand von $\hat{a}$ mit Eigenwert z.
Hinweis: Benützen Sie die Haussdorff'sche Reihe für Operatoren

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, s[\hat{A},\hat{B}]] + \ldots \tag{24}$$

Lösung: Mit $\hat{A} = \bar{z}\hat{a} - z\hat{a}^\dagger$ und $\hat{B} = \hat{a}$ gilt unter der Verwendung der Hausdorff'schen Reihe

$$\hat{D}^\dagger(z)\hat{a}\hat{D}(z) = e^{\bar{z}\hat{a} - z\hat{a}^\dagger}\hat{a}e^{z\hat{a}^\dagger - \bar{z}\hat{a}} \tag{25}$$

$$= e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} \tag{26}$$

$$= \hat{a} + [\hat{A},\hat{a}] + \frac{1}{2}[\hat{A},[\hat{A},\hat{a}]] + \ldots \tag{27}$$

$$= \hat{a} + z \tag{28}$$

mit den Kommutatoren

$$[\hat{A},\hat{a}] = [\bar{z}\hat{a} - z\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \bar{z}[\hat{a},\hat{a}] - z[\hat{a}^\dagger,\hat{a}] = z \tag{29}$$

$$[\hat{A},z] = [\bar{z}\hat{a} - z\hat{a}^\dagger, z] = \bar{z}[\hat{a},z] - z[\hat{a}^\dagger,z] = 0 \tag{30}$$

Somit folgt

$$\hat{a}\,|z\rangle = \hat{D}(z)\hat{D}^\dagger(z)\hat{a}\hat{D}(z)\,|0\rangle = \hat{D}(z)(\hat{a}+z)\,|0\rangle = \hat{D}(z)z\,|0\rangle = z\,|z\rangle \tag{31}$$

und man sieht dass $|z\rangle$ ein Eignezustand von $\hat{a}$ mit Eigenwert $z \in \mathbb{C}$ ist. Desweiteren folgt hieraus $\hat{a}^\dagger\,|z\rangle = \bar{z}\,|z\rangle$ und $\langle z|z\rangle = \langle 0|\,\hat{D}^\dagger\hat{D}\,|0\rangle = 1$.

b) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ und ihre Schwankungen Δx und Δp im Zustand $|z\rangle$ und zeigen Sie, dass kohärente Zustände immer die minimale Unschärfe besitzen. Bestimmen Sie analog den Erwartungswert der Energie und die entsprechende Schwankung ΔH.

Lösung: Für die Erwartungswerte $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ erhält man mit den Ergebnissen aus a)

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle z|\,\hat{x}\,|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle z|\,(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\,|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(z+\bar{z}), \quad \text{wobei} \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \tag{32}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle z | \, \hat{p} \, | z \rangle = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \langle z | \, \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i} \, | z \rangle = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \frac{z - \bar{z}}{i} \quad \text{wobei} \quad \hat{p} = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{33}$$

Für die Varianzen $\langle \hat{x}^2 \rangle$ und $\langle \hat{p}^2 \rangle$ erhält man

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z | \, (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \, | z \rangle \tag{34}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z | \, (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) \, | z \rangle \tag{35}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (z^2 + \bar{z}^2 - 2|z|^2 + 1) \tag{36}$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = -\frac{\hbar m \omega}{2} \langle z | \, (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \, | z \rangle \tag{37}$$

$$= -\frac{\hbar m \omega}{2} \langle z | \, (\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) \, | z \rangle \tag{38}$$

$$= -\frac{\hbar m \omega}{2} (z^2 + \bar{z}^2 - 2|z|^2 - 1) \tag{39}$$

Für die Schwankungsquadrate $(\Delta x)^2$ und $(\Delta p)^2$ gilt somit:

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [z^2 + \bar{z}^2 + 2|z|^2 + 1 - (z + \bar{z})^2] = \frac{\hbar}{2m\omega} \tag{40}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = -\frac{\hbar m \omega}{2} [z^2 + \bar{z}^2 - 2|z|^2 - 1 - (z - \bar{z})^2] = \frac{\hbar m \omega}{2} \tag{41}$$

Es ist nun leicht ersichtlich, dass kohärente Zustände die minimale Unschärfe $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ besitzen. Der Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle$ entspricht dem Erwartungswert des Hamilton-Operators $\langle \hat{H} \rangle$, also

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle z | \, \hat{H} \, | z \rangle = \hbar \omega \langle z | \, \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \, | z \rangle = \hbar \omega (|z|^2 + \frac{1}{2}) \tag{42}$$

4 Unendlich hoher Potentialtopf

Ein Teilchen der Masse m ist in einem eindimensionalen Bereich $0 \leq x \leq a$ eingeschlossen. Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist die normierte Wellenfunktion beschrieben durch:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a} \right) \right] \sin\left(\frac{\pi x}{a} \right) \tag{43}$$

a) Wie lautet die Wellenfunktion zu einem späteren Zeitpunkt $t = t_0$?
Hinweis: Leiten sie die stationären Lösungen des Problems her, und drücken sie den gegebenen Anfanszustand durch eine linearkombination stationärer Zustände aus. Folgern sie dann die allgemeine zeitabhängige Lösung. Verwenden Sie:

$$\sin(x)\cos(x) = \frac{1}{2} \sin(2x) \tag{44}$$

Lösung:

Die stationäre Schrödingergleichung für $0 \leq x \leq a$, zusammen mit der allgemeinen Lösung, lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E \psi \tag{45}$$

$$\psi(x) = A \sin(kx) \tag{46}$$

mit $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Damit wäre die Randbedingung $\psi(0) = 0$ erfüllt. Um die andere Randbedingung $\psi(a) = 0$ zu erfüllen, muss $ka = n\pi$ sein. Die normierten Eigenfunktionen lauten folglich:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n \pi x}{a} \right) \tag{47}$$

mit den entsprechenden Energie-Eigenwerten:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1,2,3,..) \tag{48}$$

Eine beliebige zeitabhängige Wellenfunktion ergibt sich aus einer Linearkombination der stationären Zustände, jeweils multipliziert mit dem dazugehörigen Zeitentwicklungsoperator:

$$\psi(x,t) = \sum_n A_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\psi_n(x) \tag{49}$$

Unsere Wellenfunktion (43) lässt sich folgendermaßen umschreiben:

$$\psi(x,t=0) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{8}{5a}}\underbrace{\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)}_{\frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)} \tag{50}$$

$$\Rightarrow\ \psi(x,t=0) = \frac{2}{\sqrt{5}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_2(x) \tag{51}$$

Der Zustand zu $t = t_0$ ist also gegeben durch:

$$\begin{aligned}\psi(x,t_0) &= \frac{2}{\sqrt{5}}\exp\left(-\frac{iE_1 t_0}{\hbar}\right)\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{5}}\exp\left(-\frac{iE_2 t_0}{\hbar}\right)\psi_2(x)\\ &= \sqrt{\frac{8}{5a}}\exp\left(-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{2}{5a}}\exp\left(-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\end{aligned} \tag{52}$$

b) Was ist der Erwartungswert der Energie bei $t = 0$ und $t = t_0$?

Lösung: Für allgemeine Zustände $\psi(x,t)$ lautet der Energie-Erwartungswert:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\rangle &= \sum_{n,m}\langle\psi_m\,|\,\hat{H}\,|\,\psi_n\rangle A_n A_m^* \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{iE_m t}{\hbar}\right)\\ &= \sum_{n,m} E_n A_n A_m^* \underbrace{\langle\psi_m\,|\,\psi_n\rangle}_{\delta_{nm}}\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{iE_m t}{\hbar}\right)\\ &= \sum_n E_n|A_n|^2 = E_1|A_1|^2 + E_2|A_2|^2 = \frac{4E_1+E_2}{5}\end{aligned} \tag{53}$$

Da die Zeitentwicklungsoperatoren sich aufheben, gilt sowohl für $t = 0$ als auch für $t = t_0$:

$$\langle E\rangle = E_1|A_1|^2 + E_2|A_2|^2 = \frac{4E_1+E_2}{5} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2} \tag{54}$$

c) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei $t = t_0$ innerhalb der linken Hälfte des Potentialtopfes ($0 \le x \le a/2$) zu finden? Wie kann man sich so ein Ergebnis anschaulich klarmachen?
Hinweis:

$$\int \sin^2(kx) = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2kx)}{4k} \tag{55}$$

Lösung:

$$\begin{aligned}P_{\left(0\le x\le\frac{a}{2}\right)} &= \int_0^{a/2}|\psi(x,t_0)|^2\,\mathrm{d}x\\ &= \frac{8}{5a}\int_0^{a/2}\left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\frac{1}{4}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)+\frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\left(e^{-\frac{3i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}}+e^{\frac{3i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}}\right)\right]\mathrm{d}x\\ &= \frac{8}{5a}\left(\frac{a}{4}+\frac{a}{16}+\frac{2a}{3\pi}\cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\right) = \frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\end{aligned} \tag{56}$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in der linken Kastenhälfte zu finden, schwankt um einen Mittelwert von 50% herum (plausibel). Durch die oszillierende $\cos(c \cdot t_0)$ (c=const.) Funktion ist die Wahrscheinlichkeit mal größer, mal kleiner, je nachdem wie lange man wartet.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist die Wellenfunktion asymmetrisch um den Punkt $a/2$ verteilt, deshalb ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf der linken Seite erstmal größer ($P = 1/2 + 16/15\pi$) als auf der anderen, das Maximum der Wellenfunktion oszilliert aber mit der Zeit immer hin und her, weshalb nach gewisser Zeit die größere Fläche auf der anderen Seite sein kann, und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der linken Hälfte unter 50% absinkt.

5 Quasistationäre Zustände

Betrachten Sie ein Teilchen, das sich im Bereich $x > 0$ im Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m\lambda_0}\delta(x-a) \tag{57}$$

bewegt, mit $\lambda_0 > 0$. Für negative x sei $V(x < 0) = \infty$. Das Teilchen befindet sich also in einem unendlich hohen Kasten der Breite a, der aber nach einer Seite durchlässig ist.

a) Geben Sie die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit Energie $E = \hbar^2k^2/2m > 0$ im Bereich $0 < x < a$ an, die die korrekte Randbedingung für $x = 0$ erfüllt.

Lösung: Für den Bereich $0 < x < a$ machen wir den Ansatz

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{58}$$

mit k gegeben durch $E = \hbar^2k^2/(2m) > 0$ und mit der Bedingung

$$\psi(x=0) = A + B = 0 \tag{59}$$

Daraus folgt (die Normierung spielt noch keine Rolle)

$$\psi(x) = \sin(kx) \tag{60}$$

b) Leiten Sie die Gleichung für den zugehörigen Wert von k aus den Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion bei $x = a$ ab unter der Annahme, dass für $x > a$ eine auslaufende ebene WElle te^{ikx} vorliegt. Diese Gleichung kann in der dimensionslosen Variable $\zeta = ka$ in der Form

$$1 - \exp\{2i\zeta\} = 2i\zeta/\beta \tag{61}$$

geschrieben werden, mit $\beta = 2a/\lambda_0$. Gibt es eine Lösung mit rein reellem k?

Lösung: Die Wellenfunktionen links und rechts des δ-Potentials sind

$$\psi_I(x) = \sin(kx) \qquad \psi_I(x)' = k\cos(kx) \qquad (0 < x < a) \tag{62}$$

$$\psi_{II}(x) = te^{ikx} \qquad \psi_{II}(x)'' = ikte^{ikx} \qquad (x > a) \tag{63}$$

Die Anschlussbedingungen bei $x = a$ sind einerseits die Stetigkeit von $\psi(x)$,

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a) \quad \Rightarrow \quad \sin(ka) = te^{ika} \tag{64}$$

und andererseits, dass $\psi'(x)$ einen Sprung um $2\psi(a)/\lambda_0$ macht:

$$\lim_{\varepsilon\to0}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x)\right] = \lim_{\varepsilon\to0}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx\, E\psi(x) = 0 \tag{65}$$

$$\Leftrightarrow \; -\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to0}[\psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon)] + \frac{\hbar^2}{m\lambda_0}\psi(a) = 0 \tag{66}$$

$$\Leftrightarrow \; \Psi'_{II}(a) - \psi'_I(a) = \frac{2}{\lambda_0}\psi(a) \tag{67}$$

$$\Leftrightarrow \; ikte^{ika} - k\cos(ka) = \frac{2}{\lambda_0}\sin(ka) \tag{68}$$

Mit Hilfe von (64) kann man die linke Seite vereinfachen zu

$$ik\sin(ka) - k\cos(ka) = -ke^{-ika} \tag{69}$$

und erhält so (mit a multipliziert und $\zeta = ka$, $\beta = 2a/\lambda_0$ substituiert)

$$-\zeta e^{-i\zeta} = \beta\sin(\zeta) = \beta\frac{1}{2i}(e^{i\zeta} - e^{-i\zeta}). \tag{70}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit $e^{i\zeta}$, so folgt die angegebene Gleichung

$$1 - e^{2i\zeta} = \frac{2i\zeta}{\beta}. \tag{71}$$

Es kann keine Lösung mit rein reellem k geben, weil die rechte Seite dann rein imaginär ist, aber auf der linken Seite $1 - e^{2i\zeta} = [1 - cos(2\zeta)] - i[sin(2\zeta)]$ der Realteil nur dann verschwindet ($2\zeta \in 2\pi\mathbb{Z}$), wenn auch der Imaginärteil Null ist.

c) Machen Sie im Limes $\beta \gg 1$ für die Lösungen den Ansatz (ε und η_n seien reell)

$$\zeta_n = n\pi(1-\varepsilon) - i\eta_n, \quad n = 1,2,3... \tag{72}$$

und bestimmen Sie ε und η_n jeweils in führender Ordnung in $1/\beta$ unter der Annahme, dass $\beta \gg 2\pi n$.
Hinweis: Zerlegen Sie die transzedente Gleichung in Real- und Imaginärteil und verwenden Sie die Entwicklung

$$\mathrm{Re}(1 - \exp 2i\zeta) \approx (2\pi n\varepsilon)^2/2 - 2\eta_n. \tag{73}$$

Lösung: Zunächst verschwindet die rechte Seite von (71) für $\beta \to \infty$, d.h. $\zeta_n = n\pi$ und $\varepsilon = 0,\ \eta_n = 0$ in nullter Ordnung. Mit Hilfe der Angabe kann man nun die linke Seite von (71) entwickeln um $\varepsilon = 0$ (bis zur zweiten Ordnung) und um $\eta_n = 0$ (bis zur ersten Ordnung),

$$1 - e^{2i\zeta_n} = 1 - e^{2\pi in}\cdot e{-}2\pi in\varepsilon\cdot e^{2\eta_n} \tag{74}$$

$$= 1 - [1 - i(2\pi n\varepsilon) - \frac{1}{2}(2\pi n\varepsilon)^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)]\cdot[1 + 2\eta_n + \mathcal{O}(\eta_n^2)] \tag{75}$$

$$\approx i(2\pi n\varepsilon) + \frac{1}{2}(2\pi n\varepsilon)^2 - 2\eta_n. \tag{76}$$

Auf der rechten Seite von (71) erhält man

$$\frac{2i\zeta_n}{\beta} = i[\frac{2\pi n}{\beta} - \frac{2\pi n\varepsilon}{\beta}] + \frac{2\eta_n}{\beta} \tag{77}$$

Da $\varepsilon = \mathcal{O}(1/\beta^2)$ ist, lautet der Imaginärteil der Gleichung (71)

$$2\pi n\varepsilon = \frac{2\pi n}{\beta} + \mathcal{O}(1/\beta^2), \tag{78}$$

also ist ε in führender (erster) Ordnung in $1/\beta$

$$\varepsilon = \frac{1}{\beta}. \tag{79}$$

Der Realteil von Gleichung (71) lautet

$$\frac{(2\pi n\varepsilon)^2}{2} - 2\eta_n = \frac{2\eta_n}{\beta} \tag{80}$$

bzw.

$$2\eta_n(1 + \frac{1}{\beta}) = 2(\pi n\varepsilon)^2 = 2(\frac{\pi n}{\beta})^2 \tag{81}$$

Damit ist η_n in führender (zweiter) Ordnung in $1/\beta$

$$\eta_n = (\pi n/\beta)^2. \tag{82}$$

d) Bestimmen Sie die zugehörigen komplexen Energien $E_n = \mathrm{Re}E_n - i\Gamma_n/2$ und geben Sie mit Hilfe der Zeitentwicklung $\propto \exp(-iE_nt/\hbar)$ stationärer Zustände eine physikalische Interpretation des Ergebnises. An welcher Stelle versagt in diesem Beispiel die übliche Argumentation, dass die Energieeigenwerte reell sein müssen?

Lösung: Mit

$$\zeta_n = \pi n(1-\frac{1}{\beta}) - i(\frac{\pi n}{\beta})^2 \tag{83}$$

folgt

$$E_n = \frac{\hbar^2(\zeta_n/a)^2}{2m} = \frac{\hbar^2(\pi n)^2}{2ma^2}[(1-\frac{1}{\beta})^2 - i\frac{2\pi n}{\beta^2} + \mathscr{O}(1/\beta^3)], \tag{84}$$

d.h. es gibt einen endlichen Imaginärteil $\Gamma_n = 2\hbar^2(\pi n)^3/(ma^2\beta^2)$.
Die Zeitentwicklung spaltet sich auf in einen Phasenfaktor und einen exponentiellen Abfall,

$$e^{ie_nt/\hbar} = e^{-i\mathrm{Re}E_nt/\hbar} \cdot e^{-\Gamma_nt/2\hbar} \tag{85}$$

wobei der erste Term die Phase repräsentiert und der zweite Term den Zerfall. Der exponentielle Abfall drückt aus, dass ein Teilchen mit endlicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich $0 < x < a$ mit einer Tunnelrate Γ_n durch das δ-Potential nach rechts wegläuft. Die Tunnelrate ist umso größer, je schwächer das Potential ist (β ist ein Maß für die Stärke des Potentials). Die Tatsache, dass k komplex ist, ist die Folge einer auslaufenden Welle-Randbedingung bei $x > a$, die nicht kompatibel ist mit der stehenden Welle bei $0 < x < a$. Dadurch wird die Kontinuitätsgleichung für stationäre Zustände, die in einer Dimension auf $j(x) = const.$ führt, explizit verletzt. Ein Hamiltonoperator wird erst mit den korrekten Randbedingungen selbstadjungiert (und hat reellel Eigenwerte), und mit einer auslaufenden WElle ist dies nicht der Fall.

6 Bandstruktur im Kronig-Penney Modell

Ein sehr einfaches Beispiel für ein periodisches Potenzial in einer Dimension ist das Kronig-Penney Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m\lambda_0}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na) \quad \text{mit} \quad \lambda_0 > 0 \tag{86}$$

a) Bestimmen sie aus der Bloch-Bedingung $\psi(x+a) = e^{iqa}\psi(x)$ die Wellenfunktion im Bereich $a < x < 2a$, die zur allgemeinen Lösung $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ in $0 < x < a$ gehört ($\hbar k = \sqrt{2mE} > 0$). Die Bedingung, dass $\psi(x)$ bei $x = a$ stetig ist und $\psi'(x)$ um $2\psi(a)/\lambda_0$ springt, ergibt ein homogenes Gleichungssystem. Nichtverschwindende Koeffizienten A und B sind also nur möglich, wenn die entsprechende Determinatne verschwindet. Bestimmen Sie daraus den impliziten Zusammenhang zwischen den erlaubten Werten von k und damit E bei gegebenem Quasi-Impuls q.

Lösung: Im Bereich 1 ($0 < x < a$) gilt

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{87}$$

$$\psi_1'(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} \tag{88}$$

Für Bereich 2 ($a < x < 2a$) gilt mit der Blochbedingung

$$\psi_2(x+a) = e^{iqa}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) \tag{89}$$

$$\psi_2'(x+a) = e^{iqa}(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}) \tag{90}$$

Wegen der Stetigkeit der Wellenfunktion an der Stelle $x = a$ gilt

$$\psi_2(0+a) - \psi_1(a) = e^{iqa}(A+B) - (Ae^{ika} + Be^{-ika}) \stackrel{!}{=} 0 \tag{91}$$

und wegen dem Sprung der Ableitung der Wellenfunktion an der Stelle $x = a$ gilt

$$\psi_2'(0+a) - \psi_1'(a) = e^{iqa}(ikA - ikB) - (ikAe^{ika} - ikBe^{-ika}) \tag{92}$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{2}{\lambda_0}\psi_2(a) = \frac{2}{\lambda_0}e^{iqa}(A+B) \tag{93}$$

Beide Bedinungen führen auf ein homogenes Gleichungssystem für die Koeffizienten A und B.

$$\begin{pmatrix} e^{iqa} - e^{ika} & e^{iqa} + e^{-ika} \\ \frac{2}{\lambda_0} e^{iqa} - ik(e^{iqa} - e^{ika}) & \frac{2}{\lambda_0} e^{iqa} + ik(e^{iqa} - e^{-ika}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \tag{94}$$

Für eine nichttriviale Lösung muss also die Determinante dieser Matrix M verschwinden. Es gilt also:

$$\det M = (e^{iqa} - e^{ika}) \left[e^{iqa}(\frac{2}{\lambda_0} + ik) - ike^{-ika} \right] - (e^{iqa} - e^{ika}) \left[e^{iqa}(\frac{2}{\lambda_0} - ik) + ike^{ika} \right] \tag{95}$$

$$= (e^{iqa})^2 - e^{iqa} \left[(1 + \frac{1}{ik\lambda_0} e^{ika}) + (1 - \frac{1}{ik\lambda_0}) e^{-ika} \right] + 1 \stackrel{!}{=} 0 \tag{96}$$

Aus dieser quadratischen Gleichung in e^{iqa} erhalten wir den impliziten Zusammenhang zwischen den erlaubten Werten von k und Quasi-Impuls q:

$$\cos(qa) = 0 \tag{97}$$

$$\cos(qa) = \cos(ka) + \frac{\sin(ka)}{k\lambda_0} \tag{98}$$

b) Schreiben Sie die Eigenwert-Bedingung in der Form

$$\cos(qa) = \frac{\cos(ka + \delta(k))}{|t(k)|} := \mu(k) \tag{99}$$

und zeigen Sie, dass dabei $t(k) = |t(k)| \exp\{i\delta(k)\}$ gerade die Transmissionsamplitude an einer einzelnen δ-Funktion ist.

Lösung: Schreibt man die Eigenwert-Bedingung gemäß der Angabe um erhält man

$$\mu(k) =: \cos(qa) = \frac{\cos(ka + \delta(k))}{|t(k)|} \tag{100}$$

$$= \frac{\cos(ka)\cos(\delta(k)) - \sin(ka)\sin(\delta(k))}{|t(k)|} \tag{101}$$

$$= \cos(ka)\frac{\cos(\delta(k))}{|t(k)|} - \frac{\sin(\delta(k))}{|t(k)|}\sin(ka) \tag{102}$$

$$\stackrel{!}{=} \cos(ka) + \frac{sin(ka)}{k\lambda_0} \tag{103}$$

Es muss also gelten:

$$|t(k)| = \cos(\delta(k)) \tag{104}$$

$$\frac{|t(k)|}{\sin(\delta(k))} = \cot(\delta(k)) = -k\lambda_0 \tag{105}$$

Wir erhalten dann

$$|t(k)| = cos(\delta(k)) = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2(\delta(k))}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{(k\lambda_0)^2}}} \leq 1 \tag{106}$$

Für die Wellenfunktion auf der linken Seite gilt:

$$\psi_{links} = e^{ikx} + re^{-ikx} \tag{107}$$

$$\psi'_{links} = ike^{ikx} - ikre^{-ikx} \tag{108}$$

und für die Wellenfunktion auf der rechten Seite gilt:

$$\psi_{rechts} = te^{ikx} \tag{109}$$

$$\psi'_{rechts} = ikte^{ikx} \tag{110}$$

Wegen der Stetigkeit der Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$ gilt

$$\psi_{links}(x = 0) \stackrel{!}{=} \psi_{rechts}(x = 0) \quad \Rightarrow \quad 1 + r = t \tag{111}$$

in übereinstimmung mit unserer Vorstellung von Reflexion und Transmission. Weiter gilt wegen dem Sprung der Ableitung der Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$

$$\psi'_{rechts}(x=0) - \psi'_{links}(x=0) \stackrel{!}{=} \frac{2}{\lambda_0} \psi_{rechts}(x=0) \quad \Rightarrow \quad ik(t+r-1) = \frac{2}{\lambda_0} t \tag{112}$$

Hieraus erhalten wir

$$t(k) = \frac{1}{1 - \frac{1}{ik\lambda_0}} = \frac{1 - \frac{i}{k\lambda_0}}{1 + \frac{1}{(k\lambda_0)^2}} = \cos(\delta(k)) \left[\cos(\delta(k)) + i \frac{\cos(\delta(k))}{\cot(\delta(k))} \right] = |t(k)| e^{i\delta(k)} \tag{113}$$

c) Zeigen Sie, dass im Limes $k \to 0$ die Phase den Wert $\delta(k \to 0) = -\frac{\pi}{2}$ annimmt und $|t(k)|$ linear in k verschwindet und interpretieren Sie dieses Ergebnis. Plotten Sie die Funktion $\mu(k)$ als Funktion von ka für den Fall $\frac{a}{\lambda_0} = 5$ und skizzieren Sie die Lage der erlaubten Energiebänder.

Lösung: Nach Aufgabe b) gilt $\cot(\delta(k)) = -k\lambda_0$ und somit $\delta(k) = \arctan(-\frac{1}{k\lambda_0})$. Wir erhalten also

$$\lim_{k \to 0} \delta(k) = \lim_{k \to 0} \arctan(-\frac{1}{k\lambda_0}) = -\frac{\pi}{2} \tag{114}$$

Desweiteren gilt

$$|t(k)| = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{(k\lambda_0)^2}}} \tag{115}$$

und wir erhalten

$$\lim_{k \to 0} |t(k)| = \lim_{k \to 0} \frac{k\lambda_0}{\sqrt{1 + (k\lambda_0)^2}} \quad \to \quad k\lambda_0 \quad \to \quad 0 \tag{116}$$

Für dem Fall $\frac{a}{\lambda_0} = 5$ lautet die Funktion $\mu(k)$ mit der Substitution $x = ka$

$$\cos(qa) = \mu(x) = \cos(x) + 5 \frac{\sin x}{x} \tag{117}$$

Diese hat nur dann Lösungen, falls $|\mu(x) \leq 1$ ist. Für $|\mu(x)| > 1$ ergeben sich nicht erlaubte Energiebänder.