

$\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\phi_n \phi_m'}_0 \Big|_a^b - \phi_m \phi_n' \Big|_a^b \right) = (E_m - E_n) \int_a^b dx \phi_m \phi_n$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\phi_m(b) \phi_n'(b)}_{<0} - \underbrace{\phi_m(a) \phi_n'(a)}_{>0} \right) = (E_m - E_n) \int_a^b dx \phi_m \phi_n$$

$\Rightarrow \phi_m(x)$ muß im Intervall $a \leq x \leq b$ Vorzeichen wechseln

falls nicht und $\phi_m > 0$ linke Seite negativ
rechte Seite positiv $\downarrow$

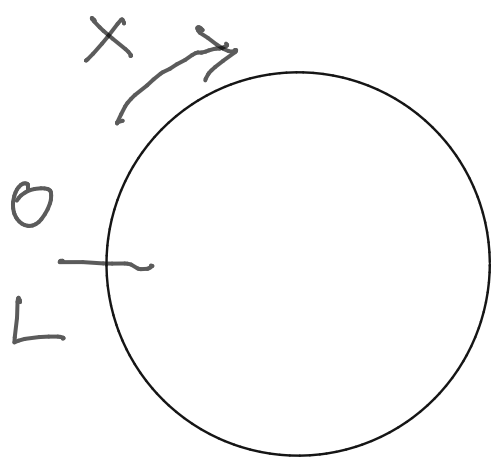
und $\phi_m < 0$ linke Seite positiv
rechte Seite negativ $\downarrow$

2.4 Freies Teilchen mit periodischen

Randbedingungen, kontinuierliche Zustände

Jetzt wollen wir uns freie Teilchen in einem endlichen System der Länge L mit periodischen Randbedingungen ansehen.

Wenn wir $L \rightarrow \infty$ gehen lassen können wir Kontinuumszustände beschreiben



entspricht
einem
Ring

$$\phi(x=L) = \phi(0)$$

$$\phi'(x=L) = \phi'(0)$$

Stationäre SGL

$$(139) \quad \phi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = -k^2 \phi(x)$$

$$(140) \quad \phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Periodische Randbedingungen

$$kL \stackrel{!}{=} 2\pi n$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

(141)

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Quantisierung
des Impulses
 $p_n = \hbar k_n$

gemeinsame EZ von $\hat{H}$ und $\hat{p}$:

$$(142) \quad \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}}$$

Orthogonalisierung

$$(143) \quad \int_0^L dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) = \frac{1}{L} \underbrace{\int_0^L dx e^{\frac{2\pi i (n-m)x}{L}}}_{= \delta_{nm} L}$$

Vollständigkeit

$$(144) \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_n(y) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i n (x-y)}{L}} = \delta(x-y) \quad \text{im Intervall } (0, L]$$

Bew.: Fourierreihen

• Grenzübergang $L \rightarrow \infty$

Impulswerte werden kontinuierlich

$$(145) \quad \begin{aligned} k_n = \frac{2\pi}{L} n &\longrightarrow k \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} &\longrightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk \end{aligned}$$

kontinuierliche Wellenfunktionen: Faktor $\frac{1}{L}$ eliminieren

$$(146) \quad \phi_n(x) \longrightarrow \phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Dann ändert sich die Orthonomierung zu

$$(147) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-i(k-k')x} \\ = \delta(k-k')$$

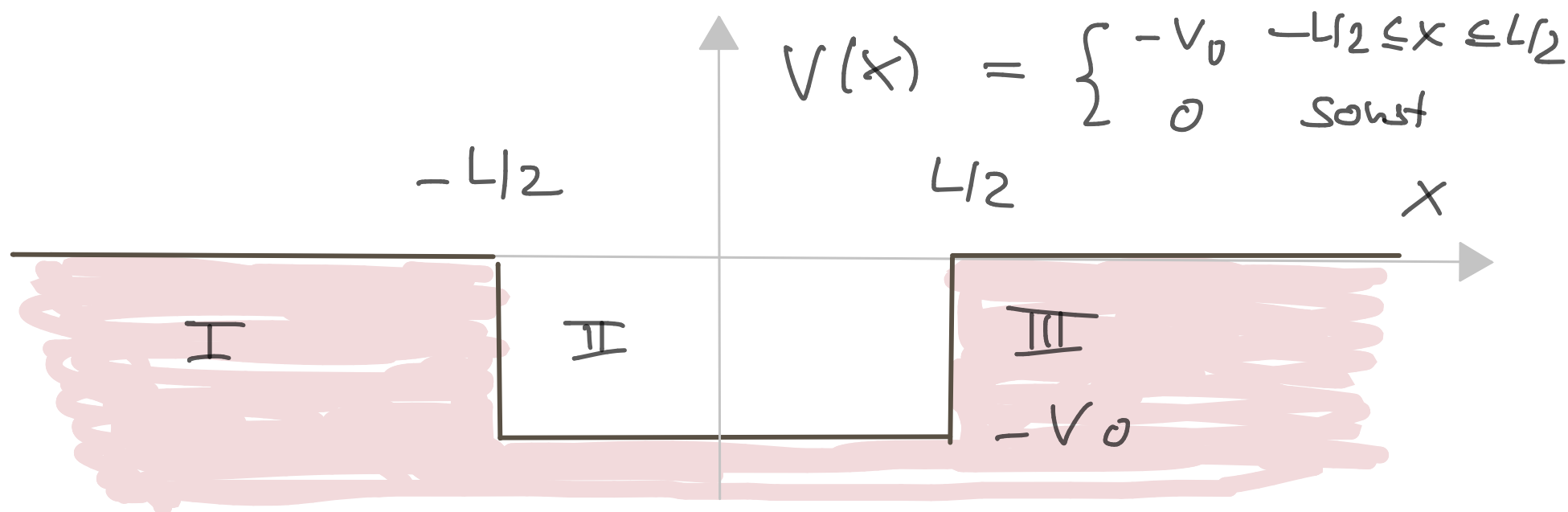
d.h. $\frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta(k-k')$

und die Vollständigkeitsrelation zu

$$\frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \underbrace{\sqrt{\frac{2\pi}{L}} \phi_k^*(x)}_{\phi_k^*(x)} \underbrace{\sqrt{\frac{2\pi}{L}} \phi_k(y)}_{\phi_k(y)} = \delta(x-y)$$

$$(148) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \phi_k^*(x) \phi_k(y) = \delta(x-y)$$

2.5 Gebundene und Streuzustände in einem endlichen Kastenpotential



zu lösen: stationäre SG

$$(74g) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_E''(x) + V(x) \phi_E(x) = E \phi_E(x)$$

in Bereichen I, II, III getrennt + Übergangsbedingungen

$\phi_E(x)$, $\phi_E'(x)$ stetig

I, III

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_{I,III}''(x) = E \phi_{I,III}(x), \quad |x| \geq \frac{L}{2}$$

II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_{II}''(x) = (E + V_0) \phi_{II}(x), \quad |x| \leq \frac{L}{2}$$

Übergangsbedingungen

$$(150) \quad \begin{aligned} \phi_I(-\frac{L}{2}) &= \phi_{II}(-\frac{L}{2}) & \phi_{II}(\frac{L}{2}) &= \phi_{III}(\frac{L}{2}) \\ \phi_I'(-\frac{L}{2}) &= \phi_{II}'(-\frac{L}{2}) & \phi_{II}'(\frac{L}{2}) &= \phi_{III}'(\frac{L}{2}) \end{aligned}$$

(A) gebundene Zustände

$$-V_0 < E < 0$$

I, III

$$\phi''(x) = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \phi(x) \equiv \kappa^2 \phi(x)$$

$$\Rightarrow \phi(x) = A_+ \exp(\kappa x) + A_- \exp(-\kappa x)$$

Damit die Lösungen normierbar sind müssen sie für $|x| \rightarrow \infty$ abfallen, d.h.

$$\phi_I(x) = A_+ e^{+\alpha x} \quad -\infty < x \leq -\frac{L}{2}$$

$$\phi_{III}(x) = A_- e^{-\alpha x} \quad \frac{L}{2} \leq x < \infty$$

II

$$\phi''(x) = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \phi(x) = -k^2 \phi(x)$$

d.h.

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = C_+ e^{+ikx} + C_- e^{-ikx}$$

Das obige Problem hat eine Inversiversionssymmetrie

$$(157) \quad V(x) = V(-x)$$

Damit sind Eigenfunktionen von H auch Eigenfunktionen von $\hat{\Pi}$ (Gl. (132))

Symmetrisch

$$\phi_E(x) = \phi_E(-x) \quad (152)$$

anti-symmetrisch

$$\phi_E(x) = -\phi_E(-x)$$

in beiden Fällen gilt

$$|\phi_E(x)|^2 = |\phi_E(-x)|^2$$

Symmetrisch

$$A_+ = A_-$$

$$C_+ = C_-$$

antisymmetrisch

$$A_+ = -A_-$$

$$C_+ = -C_-$$

Eine Auswertung der Übergangsbedingungen bei $x = (\pm)\frac{L}{2}$ liefert (wog. Symmetrie nur $+\frac{L}{2}$ oder $-\frac{L}{2}$)

symm.

$$\mathcal{R} = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \quad (153)$$

anti-symm

$$\mathcal{R} = -k \cot\left(k \frac{L}{2}\right) \quad (154)$$

Dies sind transzendente Gleichungen für E

$$\mathcal{R} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2}}$$

die wir graphisch "lösen" wollen

$$\eta \equiv \mathcal{R} \frac{L}{2} \quad \xi \equiv k \frac{L}{2}$$

$\Rightarrow$

$$\eta = \xi \tan \xi$$

Symm.

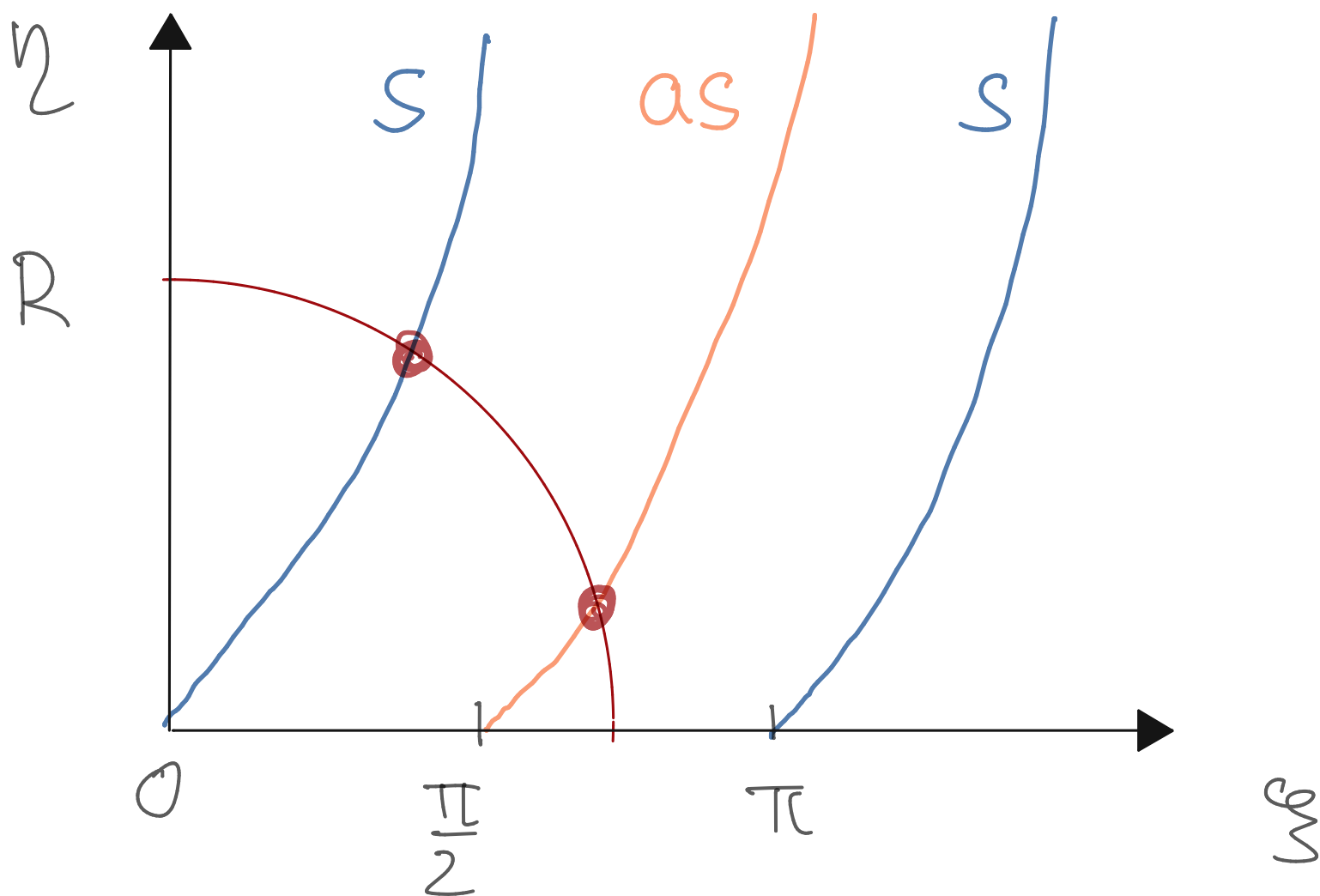
$$\eta = -\xi \cot \xi$$

anti-symm.

Es gilt

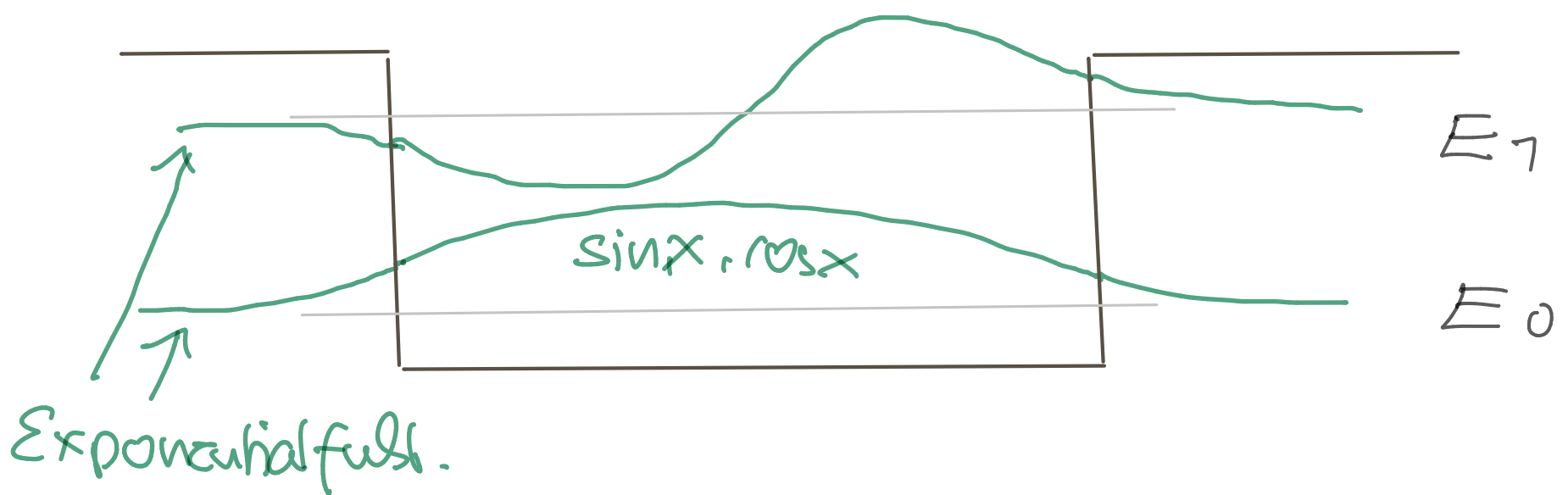
$$\eta^2 + \xi^2 = \frac{L^2}{4} (\mathcal{R}^2 + k^2) = \frac{L^2}{4} \left(\frac{2m|E|}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right)$$

$$(154) \quad = \frac{L^2 m}{2\hbar^2} V_0 \equiv R^2 \quad \text{konstante.}'$$



Wir sehen:

- $\exists$ mindestens ein gebundener Zustand
- $\exists$ nur endlich viele gebundene Zustände



- Im klassisch verbotenen Bereich klingt die Wellenfunktion exponentiell ab, da $|\psi|^2 \neq 0$

$$(155) \quad \phi \sim e^{-\kappa|x|} = e^{-|x|/d}$$

Eindringtiefe

$$(156) \quad d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}} \xrightarrow[\substack{\text{für} \\ |E| \rightarrow 0}]{} \infty$$

Quantenmechanisch können sich Teilchen im klassisch verbotenen Bereich aufhalten!

(B) Streuzustände

$$E > 0$$

Für $E > 0$ ist die gesamte x -Achse klassisch erlaubt

I, III

$$\phi'' = -k_0^2 \phi$$

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

II

$$\phi'' = -k^2 \phi$$

$$k^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} > k_0^2$$

Lösungen sind Wellen

$$(157) \quad \phi_I(x) = \alpha_+ e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x}$$

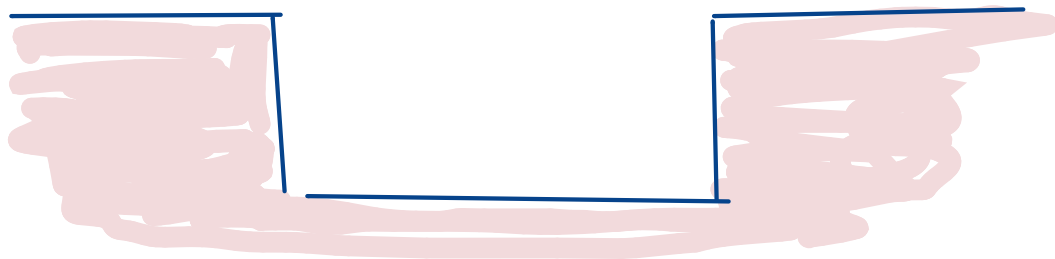
$$(158) \quad \phi_{III}(x) = \beta_+ e^{ik_0 x} + \beta_- e^{-ik_0 x}$$

$$(159) \quad \phi_{II}(x) = \gamma_+ e^{ikx} + \gamma_- e^{-ikx}$$

OBA $\beta_- = 0$ speziell $\alpha_+ = 1$ (statt $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$)

$$e^{ik_0 x} \quad \longrightarrow \quad \beta_+ e^{ik_0 x}$$

$$\alpha_- e^{-ik_0 x} \quad \longleftarrow$$



(160)

$$e^{ik_0 x - iEt/\hbar}$$

einlaufende ebene Welle

$$\alpha_- e^{-ik_0 x - iEt/\hbar}$$

reflektierte ebene Welle

$$\beta_+ e^{ik_0 x - iEt/\hbar}$$

transmittierte ebene Welle

• physikalische Bedeutung von α_- und β_+ ?

Stromdichten

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\phi^* \phi' - \phi \phi'^*)$$

einlaufende Welle

$$e^{ik_0 x}$$

$$\underline{j_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (167)}$$

reflektierte Welle

$$\alpha_- e^{-ik_0 x}$$

(162)

$$\underline{j_{\text{refl.}} = -\frac{\hbar k_0}{m} |\alpha_-|^2}$$

transmitted wave $\beta_+ e^{ik_0 x}$ (768)

$j_{\text{trans}} = \frac{\hbar k_0}{m} |\beta_+|^2$

$$j_{\text{trans}} = \frac{h k_0}{m} |\beta_+|^2$$

Transmission skoeffizient

(164)

$$T = \frac{|\hat{j}_{\text{trans}}|}{|\hat{j}_{\text{cin}}|} = |\beta_+|^2$$

Reflexionskoeffizient

(165)

$$R = \frac{|j_{\text{ref}}|}{|j_{\text{ein}}|} = |\alpha_-|^2$$

aus Kontinuitätsgleichung:

$$S(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |\phi(x)|^2 = \text{const}_t$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} = 0 \Rightarrow j = \text{const}_x$$



$$j_I = \frac{1}{2\omega_I} (\phi_I^* \phi_I' - \phi_I'^* \phi_I)$$

(166)

$$= \frac{\hbar k_0}{m} (1 - |\alpha_-|^2) = j_{\text{in}} + j_{\text{refl}}$$



$$j_{II} = \frac{th_0}{m} = j_{trans} \quad (767)$$

d.h.

$$j_{\text{ein}} + j_{\text{refl}} = j_{\text{trans}} \quad \text{oder}$$

(168)

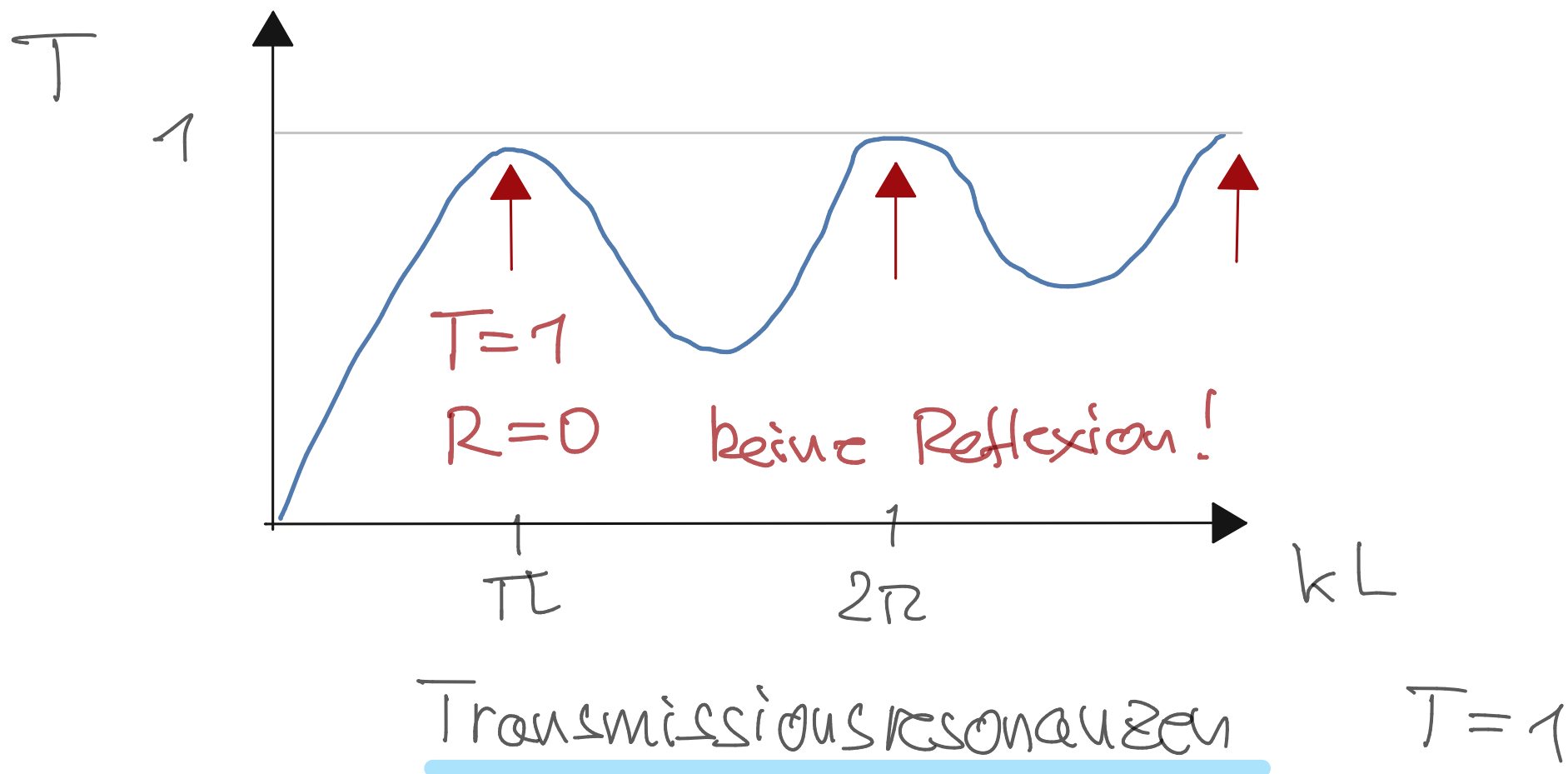
$$R + T = 1$$

Für das endliche Kastenpotential findet man
 $\Rightarrow \dots \Rightarrow$

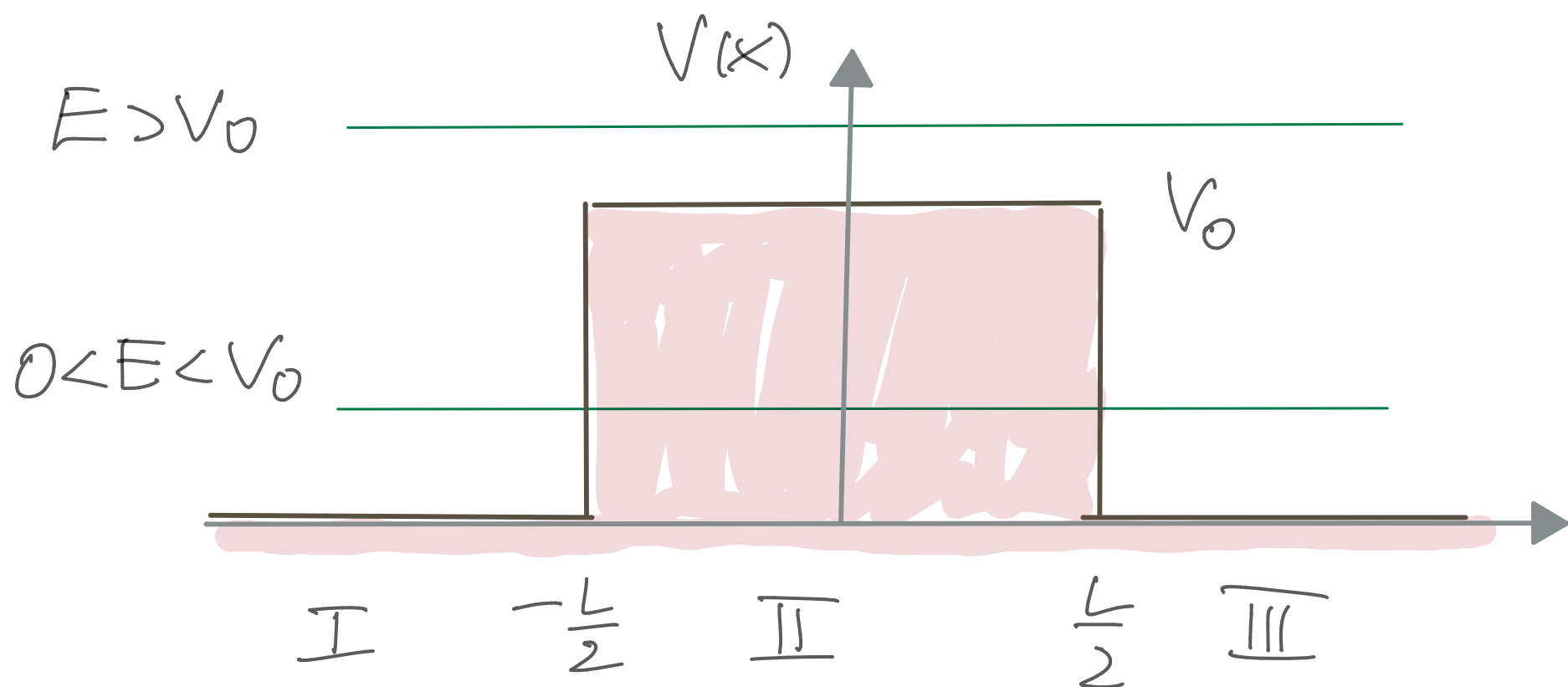
(169)

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2(kL)}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$



2.6 Endliche Kastenbarriere, Tunneleffekt



$$\boxed{E > V_0}$$

(170) $\phi_E(x) \sim \begin{cases} e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{ik_\gamma x} + \gamma_- e^{-ik_\gamma x} & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0 x} & x \geq \frac{L}{2} \end{cases}$

OBdA $\beta_- = 0$ und $\alpha_+ = 1$ (d.h. keine Normierung)

mit (171) $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ $k_\gamma^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \geq 0$

Das ist analog zu 2.5 mit $k \rightarrow k_\gamma$. Interessanter ist der Bereich

$$\boxed{0 < E < V_0}$$

klassisch gibt es keine
Transmission!

$$(172) \quad \phi_E(x) \sim \begin{cases} e^{ik_0 x} + d_- e^{-ik_0 x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{-\alpha x} + \gamma_- e^{\alpha x} & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0 x} & x \geq \frac{L}{2} \end{cases}$$

mit k_0 von oben und

$$(173) \quad \hbar^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\alpha^2} > 0$$

Man kann analog zu 2.5 vorgehen mit $k \rightarrow i\alpha$

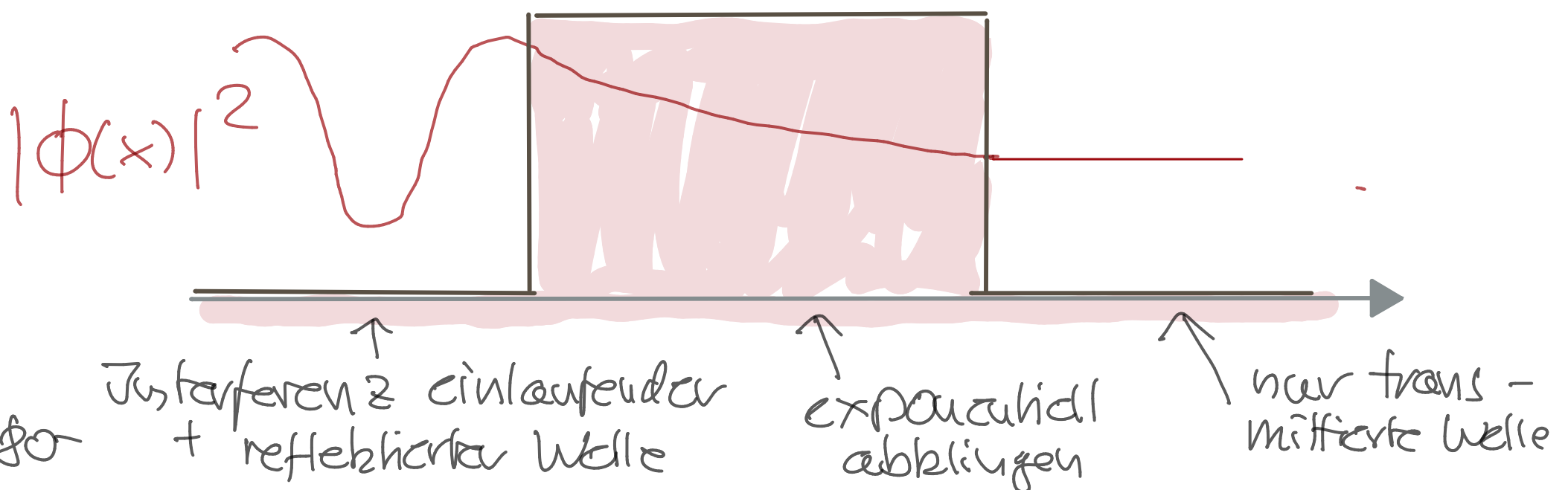
$\Rightarrow \dots \Rightarrow$

(174)

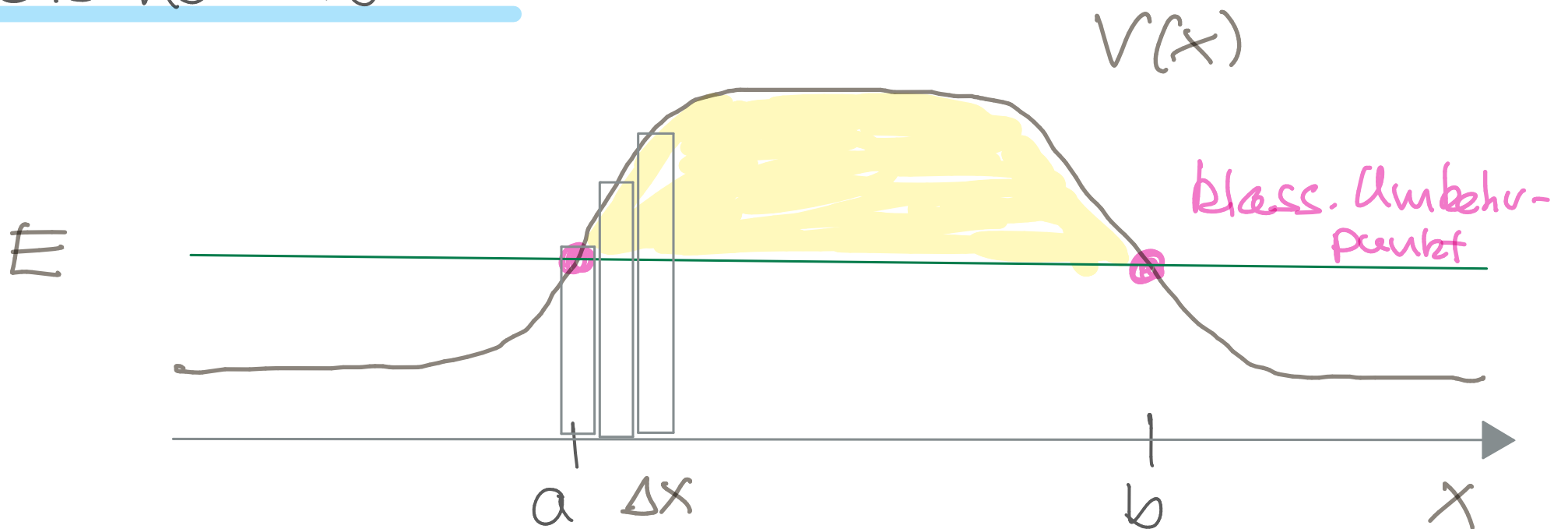
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \alpha L}$$

Es gibt eine Transmission im klassisch verbotenen Bereich

Tunnel effekt



Gamow Formel



Approximation von $V(x)$ als Abfolge kleiner Kastenbarrieren

einzelner Kasten Länge Δx und $\hbar E \Delta x \gg 1$

$$\sinh^2 \hbar \alpha \Delta x \approx \frac{1}{4} e^{2\alpha \Delta x}$$

$$T_j \approx \frac{16 E (V_j - E)}{V_j^2} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_j - E)} \Delta x \right)$$

$$T = \prod_j T_j \quad \text{Hintereinanderausfolge von Kästen}$$

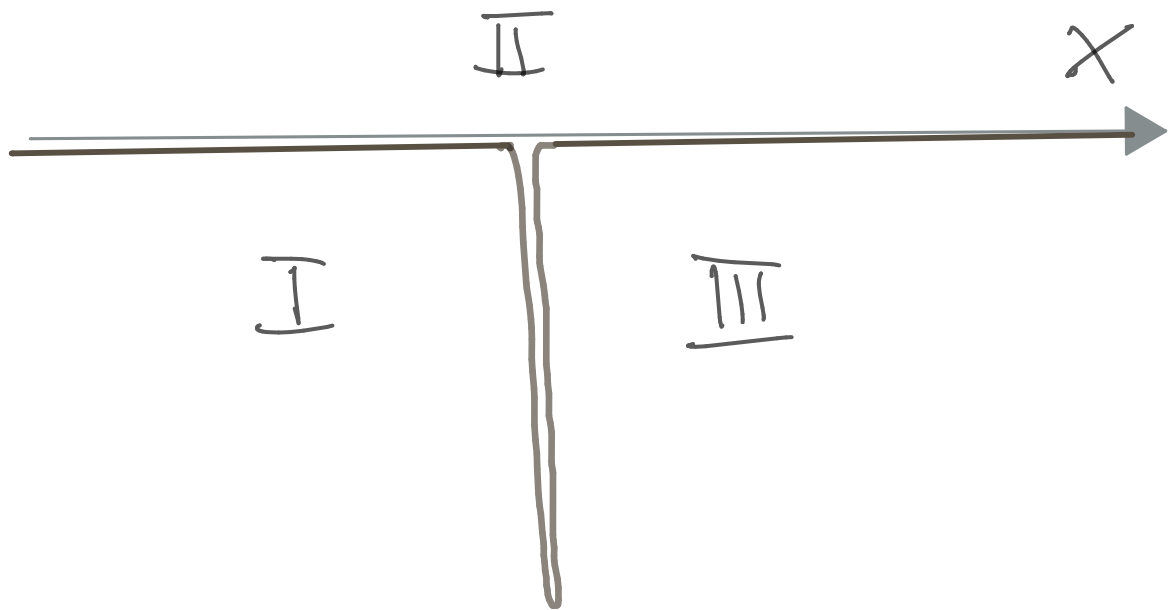
$$(175) \quad T \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)} \right\}$$

Gamow Formel

Fläche zwischen $V(x)$ und E

2.7 Attraktives Deltapotential

$$V(x) = -A \delta(x)$$



(A) Betrachten wir dazu den endlichen Potentialtopf aus 2.5 jetzt aber im Grenzfall

$$V_0 \rightarrow \infty \quad L \rightarrow 0$$

(176)

aber

$$V_0 L = A = \text{const}$$

$$\text{d.h.} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) = V_0 L = A \text{ const}$$

d.h.
(177)

$$V(x) \longrightarrow -A \delta(x)$$

Rechnung in 2.4 Gl. (154)

$$R^2 = y^2 + \frac{1}{2} \frac{m V_0}{\hbar^2} = \frac{L^2}{2} \frac{m V_0}{\hbar^2} = \frac{L m A}{2 \hbar^2} \longrightarrow 0$$

$\Rightarrow$

$\exists$ nur ein gebundener Zustand (symm.)

$$(178) \quad \mathcal{R} = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \xrightarrow{L \rightarrow 0} \frac{k^2 L}{2}$$

mit

$$\mathcal{R} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{2m(V_0 - |E|)L}{2\hbar^2}$$

d.h.

$$|E| = \frac{mL^2}{2\hbar^2} \left(\overset{\approx 0}{|E|^2} - 2\overset{\approx 0}{|E|V_0} + V_0^2 \right) \underset{(V_0 \rightarrow \infty)}{\approx} \frac{mL^2 V_0^2}{2\hbar^2}$$

$\Rightarrow$

$$(179) \quad E = -|E| = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}$$

Im gleichen Grenzfall bleiben nur die exponentiell abfallenden Teile in Gebieten I und III übrig

$$(180) \quad \phi_E(x) = W e^{-\frac{mA|x|}{\hbar^2}}$$

(B) direkte Rechnung

freies Teilchen für $x < 0$ (Region I)
und $x > 0$ (Region III)

Übergangsbedingung

$$(181) \quad \phi_{\text{I}}(0) = \phi_{\text{III}}(0)$$

Was ist mit $\phi'(x=0)$. Potential divergiert!
Integrieren wir die stationäre SQL in einer ε -Umgebung um $x=0$.

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_E(x) - A \delta(x) \phi_E(x) = E \phi_E(x) \right.$$

$$\left. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \phi_E(x) \right|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - A \phi_E(0) = 2\varepsilon E \phi_E(0)$$

$\hookrightarrow 0$
für $\varepsilon \rightarrow 0$

d.h.

$$(182) \quad \boxed{\phi_E'(+\varepsilon) - \phi_E'(-\varepsilon) = A \phi_E(0)}$$

Ableitung macht einen Sprung!

Wenn man (181) und (182) auswertet ergibt sich dasselbe Resultat wie unter (A).