# physik421 - Übung 2

Lino Lemmer — l2@uni-bonn.de
Frederike Schrödel
Simon Schlepphorst — s2@uni-bonn.de

29. April 2014

## 2.1 Entartung von Energieniveaus

Zu zeigen ist, dass bei einer eindimensionalen, stationären Schrödingergleichung mit einem zeitunabhängigen Potential $V(x)$ kein Energieniveau des diskreten Spektrums entartet ist.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x,t)=E\psi(x,t)$$

Für zwei Wellenfunktionen gilt also:

$$\begin{aligned}H\psi_1&=E\psi_1 & H\psi_2&=E\psi_2\\ E\psi_1&=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_1 & E\psi_2&=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_2\\ E\psi_1\psi_2&=\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_1\right)\psi_2 & E\psi_2\psi_1&=\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_2\right)\psi_1\end{aligned}$$

Beide Gleichungen werden nun gleich gesetzt und die Klammern aufgelöst:

$$\begin{aligned}\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_1\right)\psi_2&=\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi_2\right)\psi_1\\ -\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}}\psi_1''\psi_2+\cancel{V(x)\psi_1\psi_2}&=-\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}}\psi_1\psi_2''+\cancel{V(x)\psi_1\psi_2}\end{aligned}$$

Das liefert also:

$$\psi_1''\psi_2-\psi_1\psi_2''=0$$

Nun Integrieren wir zwei mal partiell:

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}x\,\psi_1''\psi_2-\psi_1\psi_2''&=\psi_1'\psi_2-\cancel{\int \mathrm{d}x\,\psi_1'\psi_2'}-\psi_1\psi_2'+\cancel{\int \mathrm{d}x\,\psi_1'\psi_2'}+C\\ &=\psi_1'\psi_2-\psi_1\psi_2'\end{aligned}$$

(Gesamte Gleichung sollte 2x partielle integriert werden
$\to \int(\psi_1'\psi_2-\psi_1\psi_2')=\int 0 \;....$ )



$\psi_1(\infty)\to 0 \Rightarrow const = 0$ $\quad\Rightarrow \frac{\psi_1'}{\psi_1}=\frac{\psi_2'}{\psi_2}$ $\quad\Rightarrow \int\frac{\psi_1'}{\psi_1}=\int\frac{\psi_2'}{\psi_2} \;\Big|\; \int\frac{1}{x}=\ln(x)$

$\Rightarrow \ln\psi_1=\ln\psi_2+const$ $\quad const = \ln(const')$

$\Rightarrow \ln\psi_1=\ln(\psi_2+const')$

$\psi_1=\psi_2+const'$

## 2.2 $\delta$-Potenzial

In dieser Aufgabe sollen Eigenwerte und normierte Eigenfunktionen eines $\delta$-Potentials $V(x) = -\alpha\delta(x)$ berechnet werden. Dabei sollen die Energien als negativ betrachtet werden. Es ergibt sich also die folgende Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \alpha\delta(x)\right)\psi(x,t) = -E\psi(x,t)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \alpha\delta(x)\psi = -E\psi$$

Für die Grenzbedingung bei $x = 0$:

$$\begin{aligned} E\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\, \psi &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\, \frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\, \alpha\delta(x)\psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\big(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\big) + \alpha\psi(0) \end{aligned}$$

Nun wird der Grenzwert $\epsilon \to 0$ gebildet:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\big(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\big) + \alpha\psi(0)\right)$$
$$\Longrightarrow \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^{2}}\psi(0)$$

Damit die Grenzwerte $0^+$ und $0^-$ existieren müssen die Wellengleichung $\psi$ und ihre Ableitung an der Stelle $x = 0$ stetig sein.

↳ gerade gezeigt, dass Ableitung nicht stetig (hat Sprung $-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$

## 2.3 Stückweise konstantes Potenzial

### 2.3.1 Anschlussbedingungen

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q)\right)\psi(q,t),$$

mit

$$V(q) = \begin{cases} V_1 & ,-\infty < q < -q_0 \text{ (Bereich 1)} \\ 0 & ,-q_0 < q < +q_0 \text{ (Bereich 2)} \\ V_3 & ,+q_0 < q < +\infty \text{ (Bereich 3)} \end{cases} .$$

Jetzt machen wir den Faktorisierungsansatz $\psi(q,t) = u(q)v(t)$:

$$\frac{i\hbar\frac{\partial v}{\partial t}}{v(t)} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial q^2}}{u(q)} + V(q) \stackrel{!}{=} E,$$

wobei $E$ eine konstante ist. Für die zeitabhängige Lösung ergibt sich

$$v(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Nun betrachten wir die ortsabhängige Funktion.

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial q^2} &= \big(V(q)-E\big)u(q) \\ \Longleftrightarrow \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} &= \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(q)-E\big)u \end{aligned}$$

Für Bereich 1 ergibt sich mit $\kappa_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_1 - E\right)$ die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial q^2} = \kappa_1^2 u_1,$$

mit der Lösung

$$u_1(q) = a_1 e^{\kappa_1 q} + a_2 e^{-\kappa_1 q}.$$

(Normierbarkeit für $q \to -\infty$
$\Rightarrow a_2 = 0$)
(↳ wie bei euch in Teil 2.3.2)

Bereich 3 lässt sich mit $\kappa_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_3 - E\right)$ analog lösen. Wir erhalten

$$u_3(q) = c_1 e^{\kappa_3 q} + c_2 e^{-\kappa_3 q}.$$

($c_2 = 0$)

Für Bereich 2 erhalten wir mit $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 u_2}{\partial q^2} = -k^2 u_2,$$

mit der Lösung

$$u_2(q) = b_1 e^{ikq} + b_2 e^{-ikq}.$$

Da sowohl die Funktion, als auch die Ableitung stetig sein muss erhalten wir die Randbedingungen

$$\begin{aligned} u_1\left(-q_0\right) &= u_2\left(-q_0\right) \\ u_1'\left(-q_0\right) &= u_2'\left(-q_0\right) \\ u_2\left(q_0\right) &= u_3\left(q_0\right) \\ u_2'\left(q_0\right) &= u_3'\left(q_0\right), \end{aligned}$$

oder ausgeschrieben

$$\begin{aligned} a_1 e^{-\kappa_1 q_0} + a_2 e^{\kappa_1 q_0} &= b_1 e^{-ikq_0} + b_2 e^{ikq_0} \\ \kappa_1\left(a_1 e^{-\kappa_1 q_0} - a_2 e^{\kappa_1 q_0}\right) &= ik\left(b_1 e^{-ikq_0} - b_2 e^{ikq_0}\right) \\ b_1 e^{ikq_0} + b_2 e^{-ikq_0} &= c_1 e^{\kappa_3 q_0} + c_2 e^{-\kappa_3 q_0} \\ ik\left(b_1 e^{ikq_0} - b_2 e^{-ikq_0}\right) &= \kappa_3\left(c_1 e^{\kappa_3 q_0} - c_2 e^{-\kappa_3 q_0}\right) \end{aligned}$$

### 2.3.2 Eigenenergien und transzendente Gleichung

In den Randbedingungen muss der Faktor $a_2$ verschwinden, damit die Wellenfunktion normierbar ist, ebenso der Faktor $c_1$. Wenn wir die zweite Randbedingung durch $\kappa_1$ teilen und von der ersten subtrahieren erhalten wir

$$0 = \frac{\mathrm{i}k - \kappa_1}{\kappa_1} b_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kq_0} - \frac{\mathrm{i}k + \kappa_1}{\kappa_1} b_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kq_0}.$$

Nach einem kleinen Bisschen Umformen erhalten wir daraus

$$\frac{b_1}{b_2} = \frac{\mathrm{i}k + \kappa_1}{\mathrm{i}k - \kappa_1} \mathrm{e}^{2\mathrm{i}kq_0}.$$

Teilen wir die vierte Randbedingung durch $\kappa_3$ und addieren das Ergebnis zur Dritten, ergibt sich

$$0 = \frac{\mathrm{i}k + \kappa_3}{\kappa_3} b_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kq_0} - \frac{\mathrm{i}k - \kappa_3}{\kappa_3} b_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kq_0},$$

aus dem man durch Umstellen

$$\frac{b_1}{b_2} = \frac{\mathrm{i}k - \kappa_3}{\mathrm{i}k + \kappa_3} \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}kq_0}$$

erhält. Nun setzen wir beide Ausdrücke für $\frac{b_1}{b_2}$ gleich:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{i}k - \kappa_3}{\mathrm{i}k + \kappa_3} \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}kq_0} &= \frac{\mathrm{i}k + \kappa_1}{\mathrm{i}k - \kappa_1} \mathrm{e}^{2\mathrm{i}kq_0} \\ \iff \qquad 1 &= \mathrm{e}^{-4\mathrm{i}kq_0} \frac{(\mathrm{i}k - \kappa_1)(\mathrm{i}k - \kappa_3)}{(\mathrm{i}k + \kappa_3)(\mathrm{i}k + \kappa_1)} \end{aligned}$$

Erweitern wir nun mit den komplex Konjugierten der ersten Klammer im Zähler und im Nenner, erhalten wir

$$1 = \mathrm{e}^{-4\mathrm{i}kq_0} \frac{(\mathrm{i}k - \kappa_1)(\mathrm{i}k + \kappa_1)(\mathrm{i}k - \kappa_3)^2}{(\mathrm{i}k + \kappa_3)(\mathrm{i}k - \kappa_3)(\mathrm{i}k + \kappa_1)^2}.$$

Die Multiplikation einer komplexen Zahl mit ihrer komplex Konjugierten ergibt ihr Betragsquadrat:

$$1 = \mathrm{e}^{-4\mathrm{i}kq_0} \frac{(k^2 + \kappa_1^2)}{(k^2 + \kappa_3^2)} \frac{(\mathrm{i}k - \kappa_3)^2}{(\mathrm{i}k + \kappa_1)^2}$$

Da nun gilt $V_i = \frac{\hbar^2(k^2 + \kappa_i^2)}{2m}$, erhalten wir die Beziehung

$$1 = \mathrm{e}^{-4\mathrm{i}kq_0} \frac{V_1}{V_3} \frac{(\mathrm{i}k - \kappa_3)^2}{(\mathrm{i}k + \kappa_1)^2}.$$

Diese sieht der vorgegebenen transzendenten Gleichung immerhin ziemlich ähnlich.

↳ Stimmt!
Vielleicht wäre es einfacher gewesen, wenn ihr den "Tipp" von Aufgabenzettel beachtet hättet...

### 2.3.3 Bestimmungsgleichung

### 2.3.4 Diskretes Eigenwertspektrum

### 2.3.5 Eigenwerte bei unterschiedlichen Potenzialen

## 2.4 Streuung am Potenzialwall

Stationäre Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)u(x)=Eu(x)$$

mit

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{für } |x|\geq\frac{a}{2}\\ V_0 & \text{für } |x|<\frac{a}{2}\end{cases}$$

### 2.4.1 Form der Wellenfunktion

Für das von $t$ unabhängige Potenzial $V(x)$ wird die gegebene Welle $\left(0<E<V_0\right)$ faktorisiert in $\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} = v(t)u(x)$. Des weiteren wird von dem Potenzial ein Teil reflektiert und ein Teil transmittiert.

$|x|\geq\frac{a}{2}$:

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}&=Eu(x)\\ \iff \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}&=-\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)\\ \implies u(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}&\quad\text{mit}\quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\end{aligned}$$

$|x|<\frac{a}{2}$:

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+V_0&=Eu(x)\\ \iff \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}&=\frac{2m\left(V_0-E\right)}{\hbar^2}u(x)\\ \implies u(x)=\mathrm{e}^{qx}&\quad\text{mit}\quad q=\sqrt{\frac{2m\left(V_0-E\right)}{\hbar^2}}\end{aligned}$$

$$\implies \psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & \text{für}\quad x\leq-\frac{a}{2}\\ A\mathrm{e}^{qx}+B\mathrm{e}^{qx} & \text{für}\quad -\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2}\\ T\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} & \text{für}\quad x\geq\frac{a}{2}\end{cases}$$

### 2.4.2 Anschlussbedingungen

An den Übergangspunkten muss $\psi(x)$ stetig sein.

$$
\begin{aligned}
\psi\left(-\frac{a}{2}\right): &\qquad e^{-ika/2} + Re^{ika/2} = Ae^{-qa/2} + Be^{qa/2} \\
\psi'\left(-\frac{a}{2}\right): &\qquad ike^{-ika/2} - ikRe^{ia/2} = qAe^{-qa/2} - qBe^{qa/2} \\
\psi\left(\frac{a}{2}\right): &\qquad Te^{ika/2} = Ae^{qa/2} + Be^{-qa/2} \\
\psi'\left(\frac{a}{2}\right): &\qquad ikTe^{ika/2} = qAe^{qa/2} - qBe^{-qa/2}
\end{aligned}
$$

⋮ ?

$$
\Longrightarrow \begin{pmatrix} \left(1-i\frac{q}{k}\right)e^{-qa/2} & \left(1+i\frac{q}{k}\right)e^{qa/2} \\ \left(1+i\frac{q}{k}\right)e^{qa/2} & \left(1-i\frac{q}{k}\right)e^{-qa/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2e^{-ika/2} \\ 0 \end{pmatrix}
$$

Definiere:

$$
\alpha \equiv \left(1 - i\frac{q}{k}\right)e^{-qa/2} \qquad \beta \equiv \left(1 + i\frac{q}{k}\right)e^{qa/2} \qquad \gamma \equiv 2e^{-ika/2}
$$

↳ Bitte die einzelnen Rechenschritte auch aufschreiben! Darum geht es in einer Übung.

$$
\Longrightarrow A = \frac{\alpha\gamma}{\alpha^2 - \beta^2} \qquad B = -\frac{\beta\gamma}{\alpha^2 - \beta^2}
$$

Das noch auszurechnen wird unnötig hässlich.

### 2.4.3 Reflexions- und Transmissionskoeffizient

Aus den Anschlussbedingungen folgt: ... Rechnung fehlt ...

$$
R = \frac{Ae^{-qa/2} + Be^{qa/2} - e^{-ika/2}}{e^{ika/2}}
$$

$$
T = \frac{Ae^{qa/2} + Be^{-qa/2}}{e^{ika/2}}
$$

A, B einsetzen ...