

Quantenmechanik, Blatt 5

Frederike Schrödel Heike Herr Jan Weber Simon Schlepphorst

11. Mai 2015

1 Potentialstufen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } a < x \end{cases}$$

$$I = (-\infty, 0), \quad II = [0, a], \quad III = (a, \infty)$$

Fall: $E < V_0$

Wähle einfallende Amplitude=1

Ansatz:

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = A_{II} e^{-\kappa x} + B_{II} e^{\kappa x}$$

$$\psi_{III}(x) = A_{III} e^{ikx}$$

wobei $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

Wir haben die Anschlussbedingungen:

1. $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) :$

$$1 + B_I = A_{II} + B_{II}$$

2. $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) :$

$$ik - ikB_I = -\kappa A_{II} + \kappa B_{II}$$

3. $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) :$

$$A_{II} e^{-\kappa a} + B_{II} e^{\kappa a} = A_{III} e^{ika}$$

4. $\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) :$

$$-\kappa A_{II} e^{-\kappa a} + \kappa B_{II} e^{\kappa a} = ik A_{III} e^{ika}$$

✓

Aus 1. erhalten wir:

$$B_I = A_{II} + B_{II} - 1$$

in 2.) eingesetzt:

$$ik(1 - A_{II} - B_{II} + 1) = -\kappa A_{II} + \kappa B_{II}$$

↔

$$(ik - \kappa) A_{II} = 2ik + (-\kappa - ik) B_{II}$$

↔

$$A_{II} \stackrel{*}{=} \frac{2ik + (-\kappa - ik) B_{II}}{ik - \kappa}$$

in 3.) eingesetzt:

$$\begin{aligned} A_{III}e^{ika} &= \frac{2ik + (-\kappa - ik)B_{II}}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + B_{II}e^{\kappa a} \\ &\stackrel{**}{=} \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + B_{II} \left(\frac{-\kappa - ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + e^{\kappa a} \right) \end{aligned}$$

(*) in 4.) ergibt:

$$\begin{aligned} -\kappa \frac{2ik + (-\kappa - ik)B_{II}}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + \kappa B_{II}e^{\kappa a} &= ikA_{III}e^{ika} \\ \Leftrightarrow B_{II} \left(\frac{\kappa + ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + \kappa e^{\kappa a} \right) &= ikA_{III}e^{ika} + \kappa \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} \\ \Leftrightarrow B_{II} \left(\frac{\kappa + ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + e^{\kappa a} \right) &= \frac{ik}{\kappa} A_{III}e^{ika} + \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} \end{aligned}$$

mit (**) ergibt:

$$\begin{aligned} B_{II} \left(\frac{\kappa + ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + e^{\kappa a} + \frac{ik}{\kappa} \frac{\kappa + ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} - \frac{ik}{\kappa} e^{\kappa a} \right) &= \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + \frac{ik}{\kappa} \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} \\ \Leftrightarrow B_{II} \left(\frac{(ik + \kappa)^2}{(ik - \kappa)\kappa} e^{-\kappa a} + \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a} \right) &= \frac{2ik(ik + \kappa)}{(ik - \kappa)\kappa} e^{-\kappa a} \\ \Leftrightarrow B_{II} \left(\frac{(ik + \kappa)^2}{(ik - \kappa)} e^{-\kappa a} + (\kappa - ik) e^{\kappa a} \right) &= \frac{2ik(ik + \kappa)}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} \\ \Leftrightarrow B_{II} \frac{(ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a}}{ik - \kappa} &= \frac{2ik(ik + \kappa)}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} \\ \Leftrightarrow B_{II} &= \frac{2ik(ik + \kappa) e^{-\kappa a}}{(ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a}} \end{aligned}$$

in (**) eingesetzt:

$$\begin{aligned} A_{III}e^{ika} &= \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + \frac{2ik(ik + \kappa) e^{-\kappa a}}{(ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a}} \left(\frac{-\kappa - ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + e^{\kappa a} \right) \\ &= \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa a} + \frac{2ik(ik + \kappa) e^{-2\kappa a} (-\kappa - ik)}{(ik - \kappa)((ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a})} + \frac{2ik(ik + \kappa)}{(ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a}} \\ &= 2ik \frac{e^{-\kappa a} ((ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a}) + (ik + \kappa) e^{-2\kappa a} (-\kappa - ik) + (ik + \kappa)(ik - \kappa)}{(ik - \kappa)((ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a})} \\ &= 2ik \frac{e^{-2\kappa a} (ik - \kappa)(ik + \kappa - \kappa - ik) + (ik - \kappa)(-ik + \kappa + ik + \kappa)}{(ik - \kappa)((ik + \kappa)^2 e^{-\kappa a} - (ik - \kappa)^2 e^{\kappa a})} \\ &= 2ik \frac{2\kappa}{(k + i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa a}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow A_{III} = \frac{4ik\kappa e^{-ika}}{(k + i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa a}} \quad \checkmark$$

Damit ergibt sich für den Transmissionskoeffizienten $|A_{III}|^2$:

$$\begin{aligned}
 |A_{III}|^2 &= \left| \frac{4ik\kappa e^{-ika}}{(k+i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k-i\kappa)^2 e^{-\kappa a}} \right|^2 \\
 &= 16k^2\kappa^2 \frac{1}{|(k^2 + 2ik\kappa - \kappa^2)e^{\kappa a} - (k^2 - 2ik\kappa - \kappa^2)e^{-\kappa a}|^2} \\
 &= 16k^2\kappa^2 \frac{e^{-2\kappa a}}{|k^2 + 2ik\kappa - \kappa^2 - (k^2 - 2ik\kappa - \kappa^2)e^{-2\kappa a}|^2} \\
 &= 16k^2\kappa^2 \frac{e^{-2\kappa a}}{|(k^2 - \kappa^2)(1 - e^{-2\kappa a}) + i2k\kappa(1 + e^{-2\kappa a})|^2} \\
 &= 16k^2\kappa^2 \frac{e^{-2\kappa a}}{((k^2 - \kappa^2)(1 - e^{-2\kappa a}) + i2k\kappa(1 + e^{-2\kappa a}))((k^2 - \kappa^2)(1 - e^{-2\kappa a}) - i2k\kappa(1 + e^{-2\kappa a}))} \\
 &= \frac{16k^2\kappa^2 e^{-2\kappa a}}{(k^2 - \kappa^2)^2(1 - e^{-2\kappa a})^2 + 4k^2\kappa^2(1 + e^{-2\kappa a})^2} \quad (\checkmark) \leftarrow \text{glaubt ihr hast das richtige}
 \end{aligned}$$

und den Reflexionskoeffizienten $|B_I|^2$:

$$\begin{aligned}
 |B_I|^2 &= 1 - |A_{III}|^2 \\
 &= 1 - \frac{16k^2\kappa^2 e^{-2\kappa a}}{(k^2 - \kappa^2)^2(1 - e^{-2\kappa a})^2 + 4k^2\kappa^2(1 + e^{-2\kappa a})^2}
 \end{aligned}$$

Fall: $E > V_0$

Wähle einfallende Amplitude = 1:

Ansatz:

$$\begin{aligned}
 \psi_I(x) &= e^{ik_1 x} + B_I e^{-ik_1 x} \\
 \psi_{II}(x) &= A_{II} e^{ik_2 x} + B_{II} e^{-ik_2 x} \\
 \psi_{III}(x) &= A_{III} e^{ik_1 x}
 \end{aligned}$$

wobei $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

Aus der gleichen Rechnung wie im Fall $E < V_0$ mit $k_2 = i\kappa$ erhalten wir für A_{III} :

$$A_{III} = \frac{-4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a}}$$

und damit den Transmissionskoeffizienten $|A_{III}|^2$:

$$|A_{III}|^2 = \frac{16k_1^2 k_2^2}{|(k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a}|^2} \quad (\checkmark)$$

+2 Das Prinzip ist richtig,
die Rechnungen im Prinzip auch...

Übung 3: Quantenmechanik

Wiederholung der Schrödinger-Gleichung
Schrödinger-Gleichung ab der Schrödinger-Gleichung von oben und mit

Quantenmechanik, Blatt 5

Frederike Schrödel Heike Herr Jan Weber Simon Schlepphorst

2015-05-12

2. Gebundene Zustände eines δ -Potentials

Betrachtet wird ein Teilchen mit Masse m , dass sich in einem Potential

$$V(x) = V_0 \delta(x)$$

$$V_0 < 0$$

bewege.

Es sollen die gebundenen Zustände und Eigenenergie bestimmt werden.

Ansatz:

$$\begin{aligned}\psi_- &= Ae^{qx} + A'e^{-qx} \\ \psi_+ &= B'e^{qx} + Be^{-qx}\end{aligned}$$

Dabei ist

$$q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

$$E < 0$$

Da die Wellenfunktionen ψ_- und ψ_+ normierbar sein sollen muss gelten:

$$\psi_- = Ae^{qx}$$

$$\psi_+ = Be^{-qx}$$

Aufgrund der Stetigkeit muss

$$\psi_-(0) = \psi_+(0)$$

$$\Rightarrow A = B$$

sein.

Um den Normierungsfaktor auszurechnen bilde ich das Skalarprodukt:

$$\begin{aligned}\langle \psi, \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi \\ &= |A|^2 \left(\int_{-\infty}^0 dx e^{2qx} + \int_0^{\infty} dx e^{-2qx} \right) \\ &= |A|^2 \left(\left[\frac{1}{2q} e^{2qx} \right]_{-\infty}^0 - \left[\frac{1}{2q} e^{-2qx} \right]_0^{\infty} \right) \\ &= \frac{|A|^2}{q}\end{aligned}$$

Wegen $\langle \psi, \psi \rangle = 1$ folgt

$$\Rightarrow A = \sqrt{q}$$

Also:

$$\begin{aligned}\psi_- &= \sqrt{q} e^{qx} \\ \psi_+ &= \sqrt{q} e^{-qx} \checkmark\end{aligned}$$

Um die Energie zu bestimmen löse ich die Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + E\psi = V_0 \delta(x)\psi$$

Integration von ϵ bis $-\epsilon$ über x und bilden des Limes gibt:

$$\Leftrightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx E\psi \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx V_0 \delta(x)\psi$$

Die Integration beim zweiten Integral gibt nach dem ausführen des Limes null für den Rest ergibt sich:

$$\begin{aligned}&\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) = V_0 \psi(0) \quad \text{← } \psi \text{ hat Sprung bei } x=0 \\ &\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (-\sqrt{q} q e^{-q\epsilon} - \sqrt{q} q e^{-q\epsilon}) = V_0 \sqrt{q} \\ &\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2 q}{m} = V_0\end{aligned}$$

Einsetzen von q gibt:

$$\Leftrightarrow -\frac{2E\hbar^2}{m} = V_0^2$$

$$\Leftrightarrow E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$
✓
Schön! + 2

4. Adjungieren

Gegeben sind mehrere Ausdrücke. Es sollen der Typ und das Adjungierte bestimmt werden.

4.a.

$$(\hat{A} + \lambda \hat{B}^\dagger) |\psi_1\rangle$$

ist ein Zustand, das Adjungierte ist:

$$\langle \psi_1 | (\hat{A}^\dagger + \lambda^* \hat{B})$$
✓

4.b.

$$\hat{A} |\psi_1\rangle \langle \psi_2| \lambda \hat{B} \hat{C}$$

ist ein Operator, das Adjungierte ist:

$$\lambda^* \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger |\psi_2\rangle \langle \psi_1| \hat{A}^\dagger$$
✓

4.c.

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle |\psi_1\rangle$$

ist ein Zustand, das Adjungierte ist:

$$\langle \psi_1 | \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle$$
✓

4.d.

$$\langle \psi_2 | \hat{A} \hat{B}^\dagger \hat{C}^\dagger | \psi_1 \rangle$$

ist ein Skalar, das Adjungierte ist:

$$\langle \psi_1 | \hat{C} \hat{B} \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle \quad \checkmark$$

4.e.

$$\langle \psi_1 | (\hat{C} + \hat{D}^\dagger)(\hat{A} - i\hat{B}) | \psi_2 \rangle$$

ist ein Skalar, das Adjungierte ist:

$$\langle \psi_2 | (\hat{A}^\dagger + i\hat{B}^\dagger)(\hat{C}^\dagger + \hat{D}) | \psi_1 \rangle \quad \checkmark$$

3. Schrödinger-Gleichung für das 1-dimensionale S-Potential

$$V(x) = V_0 [\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad \text{mit } V_0 < 0 \text{ und } a > 0$$

a)

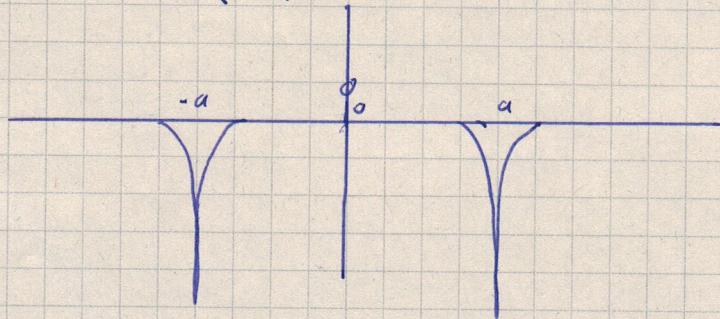
$$\psi_{\pm}(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} + A'e^{-\alpha x} & x \leq -a \\ Be^{\alpha x} \pm Be^{-\alpha x} & -a \leq x \leq a \\ +Ae^{-\alpha x} \mp A'e^{\alpha x} & x \geq a \end{cases}$$

vereinfacht:

$$\psi_{\pm}(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & x \leq -a \\ Be^{\alpha x} \pm Be^{-\alpha x} & -a \leq x \leq a \\ +Ae^{-\alpha x} & x \geq a \end{cases}$$

↙ Warum kann es
so vereinfacht
werden!

b)



Aufgrund der Symmetrie des Potentials kommt es bei den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators zu symmetrischen oder antisymmetrischen Lösungen. Sym.: $\psi_s(x) = \psi_s(-x)$. Antisym.: $\psi_a(x) = -\psi_a(-x)$

=> für

$$\Rightarrow \psi_s = \begin{cases} Ae^{\alpha x} \\ B \cosh(\alpha x) \\ Ae^{-\alpha x} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi_a(x) = \begin{cases} -Ae^{\alpha x} \\ B \sinh(\alpha x) \\ Ae^{-\alpha x} \end{cases}$$

(Um eine Beziehung zwischen A und B

+ 0