Übung 1. *[Streuung an der endlichen Potentialbarriere]*

Betrachte die Streuung eines von $x = -\infty$ einfallenden Teilchenstromes an der Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x \in \left]-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right[\\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad \text{wobei} \quad V_0 > 0\,.$$

(a) Berechne die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten $R(E)$ und $T(E)$ für die Teilchenenergien $0 < E < V_0$ und $E > V_0$.

(b) Skizziere die Energieabhängigkeit von $R(E)$ für Energien $E > V_0$ und interpretiere das Ergebnis.

(c) Skizziere die Ortswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ für Energien $0 < E < V_0$. Wie verhält sich die Durchlässigkeit $T(E)$ in diesem Energiebereich im Grenzwert grosser Barrierenbreite a?

Lösung.

(a) Analog zu Aufgabe 3 in Serie 3 nehmen wir die abschnittsweisen Lösungen der Schrödingergleichung, d.h.

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{I}}(x) &= A_1\, e^{ik_1x} + A_1'\, e^{-ik_1x}\,,\\ \psi_{\mathrm{II}}(x) &= A_2\, e^{k_2x} + A_2'\, e^{-k_2x}\,,\\ \psi_{\mathrm{III}}(x) &= A_3\, e^{ik_3x} + A_3'\, e^{-ik_3x}\,,\end{aligned}$$

wobei $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ und $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$. Dabei ist $A_3' = 0$, da das Teilchen von $x = -\infty$ kommt.

Aus den Stetigkeits- und Differenzierbarkeitsbedingungen lässt sich folgender Zusammenhang ableiten:

$$A_1 = A_3\, e^{i\,k_1\,a}\left(\cosh(k_2\,a) + i\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2}\sinh(k_2\,a)\right)\,.$$

Der Transmissionskoeffizient ist gegeben durch den Quotienten der Amplitude von transmittiertem und einfallendem Wellenanteil, d.h.

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{\cosh^2(k_2\,a) + \left(\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2\,a)} = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2+k_2^2)^2\sinh^2(k_2\,a)}\,.$$

Der Reflexionskoeffizient ist definiert durch

$$R := 1 - T = \frac{(k_1^2+k_2^2)^2\sinh^2(k_2\,a)}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2+k_2^2)^2\sinh^2(k_2\,a)}$$

und einsetzen von k_1 und k_2 führt letztlich zu

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E) + V^2\sinh^2(a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)})}\,,\\ R(E) &= \frac{V_0^2\sinh^2(a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)})}{4E(V_0-E) + V_0^2\sinh^2(a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)})}\,. \end{aligned} \tag{L.1}$$

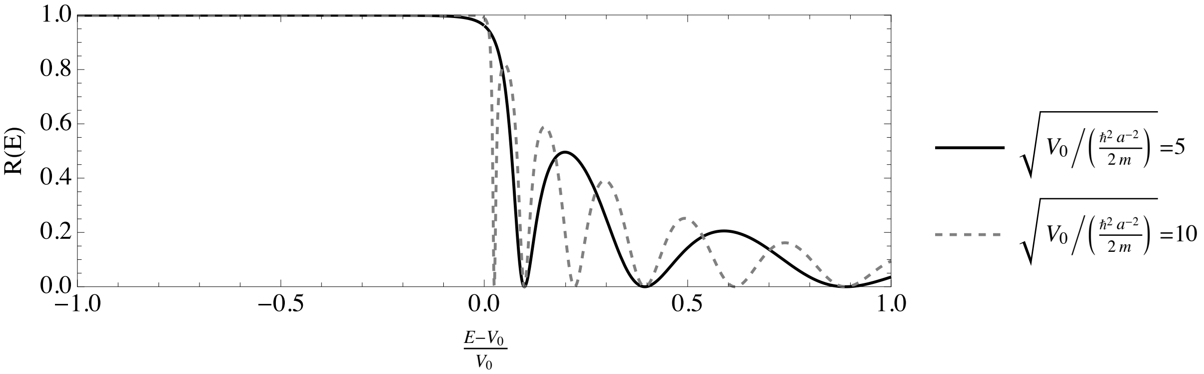

Abbildung 1: Reflektionskoeffizient $R(E)$ als Funktion der Energie der einfallenden Wellenfunktion für verschiedene Ausdehnungen a des Potentialtopfs. Den Transmissionskoeffizienten erhält man entsprechend mit $T = 1 - R$.

(b) Für $E > V_0$ wird k_2 imaginär, d.h. $k_2 = i\,k_2'$ für $k_2' \in \mathbb{R}$, d.h. im Endergebnis ersetzt man "sinhmit "i sin". Für den Transmissionskoeffizienten findet man somit

$$T = \frac{4k_1^2 k_2'^2}{4k_1^2 k_2'^2 + (k_1^2 - k_2'^2)\sin^2(k_2\,a)} = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}\,a\right)}$$

und für den Reflexionskoeffizienten ergibt sich

$$R = \frac{(k_1^2 - k_2'^2)\sin^2(k_2'\,a)}{4k_1^2 k_2'^2 + (k_1^2 - k_2'^2)^2 \sin^2(k_2'\,a)} = \frac{V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}\,a\right)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}\,a\right)}\,.$$

Wie man Abbildung 1 entnehmen kann, erhält man also für $R(E)$ ein Kurve, die bei $E = V_0$ bei dem Wert $R(0)$ beginnt und für grosse Energien wie erwartet gegen Null geht, und dabei oszilliert. Die Nullstellen findet man bei $n^2\pi^2 = a^2 \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$, d.h. für die Energien

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + V_0\,.$$

(c) Bildet man das Betragsquadrat von ψ für die drei verschiedenen Bereiche, so erhält man, wie in Abbildung 2 für den Bereich I eine Überlagerung zwischen ein- und auslaufender Welle. Dies gibt einen sinusförmigen Verlauf, der um einen bestimmten Wert oszilliert. Im Bereich II erhält man einen exponentiellen Abfall, für den Bereich III ergibt sich dann ein konstanter Wert, da man nur noch eine nach rechts laufende Welle übrig bleibt.
Für grosse Werte von a spielt nur die exponentiell-ansteigende e-Funktion im Nenner von $T(E)$ eine Rolle, d.h.

$$T(E) \approx \frac{4E(V_0 - E)}{V^2 \frac{1}{2} e^{a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}}} \sim e^{-a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}} \xrightarrow[a\to\infty]{} 0\,.$$

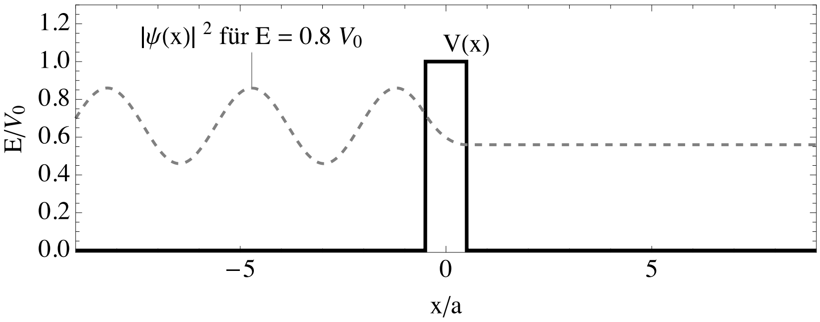

Abbildung 2: Amplitudenquadrat $|\psi(x)|^2$ als Funktion des Ortes x für einfallende Wellen mit kleinerer Energie als die Potentialbarriere, d.h. $0 < E < V_0$.

Übung 2. *[Dynamik im δ-Potential]*

Im Folgenden untersuchen wir das eindimensionale, attraktive Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\alpha}{2m}\,\delta(x)\,, \qquad \textit{wobei} \quad \alpha > 0\,. \tag{1}$$

(a) *Wie lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für dieses Potential?*

(b) *Zeige mit Hilfe dieser Schrödinger-Gleichung, dass die Eigenfunktionen $\psi(x)$ eine unstetige Ableitung der Form*

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[\partial_x\psi(\epsilon) - \partial_x\psi(-\epsilon)\right] = \eta\,\psi(0)$$

haben. Welchen Wert nimmt η für das gegebene Potential an? Was ändert sich, wenn man zu $V(x)$ ein stetiges Potential $U(x)$ addiert?

(c) *Gib die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für Energien $E < 0$ im Bereich $x < 0$ und $x > 0$ an.*

(d) *Wie viele gebundene Zustände hat dieses Potential? Bestimme die zugehörigen Energien und gib die normierten Wellenfunktionen an.*

Lösung.

(a) $H\psi = E\psi$ mit $H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\,\delta(x)$.

(b) Damit $|\psi(x)|^2$ überall ausser bei $x = 0$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann, muss die Diskontinuität bei $x = 0$ endlich sein, so dass

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \mathrm{d}x\,\psi(x)\bigg|_{\epsilon\to 0} = 0\,.$$

Daraus folgt

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \mathrm{d}x \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\delta(x)\right]\psi(x) = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \mathrm{d}x\,\psi(x),$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \mathrm{d}x \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)\right]_{\epsilon\to 0} - \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\psi(0) = 0,$$

$$\Rightarrow \lim_{\epsilon\to 0}\left[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] = (-\alpha)\psi(0).$$

Im Falle eines zusätzlichen stetigen Potential-Terms ändert sich nichts.

(c) Sei Region I definiert durch $x < 0$ und Region II definiert durch $x > 0$.

I: $\psi_I(x) = A\mathrm{e}^{\kappa x}$, $\qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$,

II: $\psi_{II}(x) = B\mathrm{e}^{-\kappa x}$,

da nur die exponentiell abfallende und damit normierbare Lösungen relevant sind.

(d) Die Stetigkeits- und Differenzierbarkeitsbedingungen lauten

1. $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$,
2. $\lim_{\epsilon\to 0}\left[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] = -\alpha\psi(0)$.

Aus 1) folgt $A = B$. Aus 2) folgt

$$-\kappa A - A\kappa = (-\alpha)A \qquad \Rightarrow \qquad 2\kappa = \alpha \qquad \Rightarrow \qquad E = -\frac{\hbar^2\alpha}{8m} \; . \tag{L.2}$$

Es existiert somit genau ein gebundener Zustand. Aus der Normierung erhält man

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |\psi(x)|^2 = N^2 \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{2\kappa x} + N^2 \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-2\kappa x} = \frac{N^2}{\kappa} \stackrel{!}{=} 1 \; .$$

Man findet somit $N = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$ und folglich

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\, \mathrm{e}^{-\kappa|x|} \tag{L.3}$$

Übung 3. *[Floquet Theorem]*

Betrachten Sie die eindimensionale Schrödingergleichung mit einem periodischen Potential $V(x) = V(x+a)$. Der Translationsoperator $T(a)$ ist gegeben durch $T(a) = \exp(ipa/\hbar)$, wobei p der Impulsoperator ist.

(a) *Zeigen Sie, dass $T(a)\eta(x) = \eta(x+a)$ für eine beliebige Testfunktion $\eta(x)$.*

(b) *Zeigen Sie, dass der Translationsoperator $T(a)$ mit dem Hamiltonoperator des Systems $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ vertauscht.*

(c) *Zeigen Sie, dass der Translationsoperator $T(a)$ unitär ist. Was folgt daraus für die Eigenwerte von $T(a)$?*

(d) *Zeigen Sie unter Verwendung von Aufgabenteil (a), (b) und (c), dass für die gemeinsamen Eigenfunktionen $\varphi(x)$ des Hamiltonoperator H und des Translationsoperators $T(a)$*

$$\varphi(x+a) = \exp(ika)\varphi(x) \quad (|ka| \leq \pi)$$

gilt.
Hinweis: Um die Form der Eigenwerte von T weiter einzuschränken benutzen Sie, dass $T^2(a)\varphi(x) = T(2a)\varphi(x)$.

Lösung.

(a) Einsetzen des Impulsoperators im Ortsraum liefert

$$\begin{aligned} T(a)\eta(x) &= \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)\eta(x) = \exp\left(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\eta(x) \\ &= \eta(x) + a\frac{\mathrm{d}\eta(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{a^2}{2!}\frac{\mathrm{d}^2\eta(x)}{\mathrm{d}x^2} + ... = \eta(x+a), \end{aligned} \tag{L.4}$$

wobei wir die Reihendarstellung der Exponentialfunktion verwendet haben.

(b) Der Translationsoperator vertauscht trivialerweise mit der kinetischen Energie $p^2/2m$. Wir betrachten die Wirkung von $[T(a), V(x)]$ auf eine beliebige Testfunktion $\eta(x)$:

$$\begin{aligned} [T(a), V(x)]\eta(x) &= T(a)\ (V(x)\eta(x)) - V(x)\,T(a)\,\eta(x) \\ &= V(x+a)\eta(x+a) - V(x)\eta(x+a) = 0 \end{aligned} \tag{L.5}$$

Im letzten Schritt haben wir die Periodizität des Potentials verwendet.

(c) Um zu zeigen, dass $T(a)^\dagger = T(a)^{-1}$ betrachten wir

$$\langle\alpha|\, T(a)^\dagger T(a)\, |\beta\rangle\,,$$

hierbei sind α und β zwei beliebige Zustände im Hilbertraum. Da die Eigenfunktionen zum Impulsoperator eine vollständige Basis im Hilbertraum bilden gilt weiter

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\, T(a)^\dagger T(a)\, |\beta\rangle &= \int \mathrm{d}p\, \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\, \langle\alpha|p'\rangle \langle p'|\, T(a)^\dagger\, |p\rangle \langle p|\, T(a)\, |p''\rangle \langle p''|\beta\rangle \\ &= \int \mathrm{d}p\, \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\, \langle\alpha|p'\rangle \langle p|\, T(a)\, |p'\rangle^\star \langle p|\, T(a)\, |p''\rangle \langle p''|\beta\rangle \\ &= \int \mathrm{d}p\, \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\, \exp\big(ip'a/\hbar\big)^\star \exp\big(ip''a/\hbar\big)\, \langle\alpha|p'\rangle \langle p'|p\rangle \langle p|p''\rangle \langle p''|\beta\rangle \\ &= \int \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\, \exp\big(i(p''-p')a/\hbar\big)\, \langle\alpha|p'\rangle \langle p'|p''\rangle \langle p''|\beta\rangle \\ &= \langle\alpha|\beta\rangle\,, \end{aligned} \tag{L.6}$$

wobei wir verwendet haben, dass $T(a)\,|p\rangle = \exp(iap/\hbar)\,|p\rangle$ (p kein Operator auf der rechten Seite). Die Eigenwerte λ eines unitären Operators haben alle Norm Eins, d.h. $|\lambda| = 1$.

(d) Das Eigenwertproblem des Translationsoperators $T(a)$ hat die Form

$$\varphi(x+a) = T(a)\varphi(x) = \lambda(a)\,\varphi(x). \tag{L.7}$$

Aus Aufgabenteil (c) wissen wir, dass die Eigenwerte von $\lambda(a)$ die Norm Eins besitzen. Deshalb können wir diese allgemein schreiben als

$$\lambda(a) = \exp(i\beta(a)),$$

wobei β eine reelle Funktion ist. Aus $T^2(a)\varphi(x) = T(2a)\varphi(x)$ folgern wir für die Eigenwerte

$$\lambda^2(a) = \lambda(2a) \Rightarrow 2\beta(a) = \beta(2a) \Rightarrow \beta(a) = ka.$$

Da $\beta(a{+}2\pi)$ und $\beta(a)$ die gleichen Eigenwert liefern, kann β auf ein 2π-Intervall beschränkt werden, z.B. mit der Bedingung $|ka| < \pi$.