6 Anwendungen

6.1 Potentialtopf mit unendl. hohen Wänden

Wir betrachten einen 1-dim., unendlich hohen Potentialtopf, (siehe Übungen)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } -L/2 < 0 < L/2 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \qquad (6.1)$$

Dies ist ein zeitunabhängiges Potential, und wir werden die stat. Schrödingergleichung

$$\overbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right]}^{\hat{H}} \Psi(x) = E\, \Psi(x) \qquad (6.2)$$

lösen. Für $x \in [-L/2, L/2]$ verschwindet das Pot. und wir haben

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = E\, \Psi(x) \qquad (6.3)$$

Gl. (6.3) ist eine 1-dim Wellengl. und wir haben

$$\psi(x) = A \cdot \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + B \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \qquad (6.4)$$

Außerhalb des Intervalls $(-L/2, L/2)$ ist das Potential ∞ und es gilt

$$\psi(x \notin [-L/2, L/2]) = 0 \qquad (6.5)$$

Die Fkt $\psi(x)$ muss bei $x = \pm L/2$ stetig sein , siehe S. 152a

und es folgt

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_+$$

$n \neq 0$

Außerdem

$$n = 2l+2: \quad A = 0 \qquad (6.6)$$

$l \in \mathbb{N}_+$

$$n = 2l+1: \quad B = 0$$

Damit haben wir Energieeigenwerte

$$\boxed{E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \qquad (6.7)}$$

Die Wellenfkt. sind auf 1 normiert und daher gilt $\quad A/B = \sqrt{2/L} \qquad (6.8)$

Die Wellenfkt. $\psi(x)$ erfüllt (sei $V(|x| \geq L/2)$ groß aber endl.)

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi(x) \qquad (6.9)$$

und damit

$$\int_{-\infty}^{0} dx\, \psi''(x)\, f(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{0} dx \left[E - V(x)\right]\psi(x)\, f(x) \qquad (6.10)$$

2mal stetig diffbar

Sei $\psi(x)$ glatt außer bei $x = -L/2$.

Dann gilt

$$\lim_{\varepsilon \to 0_+} \int_{-L/2-\varepsilon}^{-L/2+\varepsilon} dx\, \psi''(x)\, f(x) = 0, \qquad (6.11)$$

Im Integral in (6.11) kann nur der singuläre Anteil von ψ'' beitragen:

$$\psi''_{sing} = \sum_{n=0}^{n_{max}} c_n\, \delta^{(n)}(x) \qquad (6.12)$$

Einsetzen von (6.12) in (6.11) gibt

$$\sum_{n=0}^{n_{max}} (-1)^n c_n\, f^{(n)}(-L/2) = 0 \quad \forall f \qquad (6.13)$$

$$\Rightarrow \boxed{c_n = 0}$$

Es folgt, daß $\psi''(x)$ nur Sprungstellen haben kann, d.h., ψ & ψ' sind stetig.

Für $V(|x|>a/2) \to \infty$ gilt allerdings

$$\psi(|x|>a/2) \triangleq 0$$

und damit springt notwendigerweise auch schon $\psi'(\pm a/2)$.

Die Lösungen $\psi_n(x)$ mit E_n in Gl. (6.7) sind entweder symmetrisch, $n = 2l$, oder antisymmetrisch, $n = 2l+1$, <u>und</u> $\boxed{n \neq 0}$, d.h.

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x) \tag{6.14}$$

Die (Punkt) Spiegelung $\hat{P}$ der Ortskoordinate nennt man <u>Parität</u>

$$\hat{P} f(x) = f(-x) \tag{6.15}$$

Es gilt für V in Gl. 6.1,

$$\hat{P}\hat{H}\psi(x) = \hat{H}\hat{P}\psi(x) \quad \text{oder} \quad [\hat{P},\hat{H}] = 0 \tag{6.16}$$

wg. $\hat{P}V(x) = V(-x) = V(x)$. Damit ist $\hat{P}\psi_n$ auch Eigenfkt von $\hat{H}$. Es gilt allgemein. Wenn

$$[A, B] = 0 \quad \text{und} \quad A|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle \tag{6.17}$$

$$\Rightarrow \quad B\varphi_n \text{ ist Efkt von } A \text{ und } B$$

Beweis: $\quad A B|\varphi_n\rangle = B A|\varphi_n\rangle = \lambda_n B|\varphi_n\rangle \qquad (6.18)$

Daraus folgt, daß $B|\varphi_n\rangle = \beta_n|\varphi_n\rangle$ (λ_n nicht entartet) und daher ist β_n EW von B zur EF φ_n.

Anders ausgedrückt, können wir A und B gleichzeitig diagonalisieren,

$$A = \sum_n \lambda_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

$$B = \sum_n \beta_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \qquad (6.19)$$

In unserem Fall ist $\beta_n = (-1)^n$. Wir folgern allgemein, daß die Eigenfkt. ψ_n eines Hamiltonoperators $\hat{H}$ dieselben Symmetrien $\hat{S}$ wie $\hat{H}$ haben $[\,[\hat{H},\hat{S}]=0 \Rightarrow \psi_n$ EF zu $\hat{S}\,]$

Ein letzter wichtiger Punkt hängt mit dem Fehlen der konst. Lösung ($n=0$) zusammen.

wg Stetigkeit

Es gilt, daß

$$E_{min} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 > 0 \qquad (6.20)$$

Die Orts- und Impulsunschärfe folgt mit

$\langle x \rangle = 0 = \langle p \rangle$ aus $(x' = x + L/2)$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L dx\, x^2 \sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}x\right)$$

siehe Übung

$$= L^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right) \xrightarrow{n\to\infty} L^2/12$$

und $\langle p^2 \rangle = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$ (6.21)

Es folgt, daß

$$\Delta x_n \Delta p_n > \Delta x_1 \Delta p_1 = \hbar/2 \; \pi/\sqrt{3} \qquad (6.22)$$

Bemerkung: Die "Lösung" mit $E_0 = 0$ und

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L}}\,\Theta(x + L/2)\,\Theta(L/2 - x) \qquad (6.23)$$

erfüllt die Schrödingergl. (6.2) "nur" nicht bei $x = \pm L/2$.

Was ist mit der Unschärferelation?