

## 11 Übungsblatt Theoretische Physik IV

### 11.1 (Doppelmulden-Potential)

Ein grobes Modell für Molekülbindungen ist das durch  $\delta$ -Funktionen genäherte eindimensionale Doppelmulden-Potential

$$V(x) = -\lambda(\delta(x-a) + \delta(x+a)),$$

mit  $\lambda > 0$ ,  $a > 0$ .

a)

Es sind die (nicht-normierten) gebundenen Eigenzustände des Systems mit gerade und ungerader Parität und die dazugehörigen Bedingungen für die Energieeigenwerte zu bestimmen. Wir betrachten die Schrödingergleichung für dieses Problem:

$$H\psi(x) = E\psi(x),$$

mit  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \lambda(\delta(x-a) + \delta(x+a))$ , somit folgt also:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \lambda\delta(x-a) - \lambda\delta(x+a) \right] \psi(x) = E\psi(x).$$

Wir wollen die Bedingung für die erste Ableitung der Wellenfunktion an den Stellen  $x_0 = \pm a$  finden, wobei die Wellenfunktion in diesen Punkten stetig ist, hierzu integrieren wir von  $x_0 - \varepsilon$  bis  $x_0 + \varepsilon$ . Es ergibt sich:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \lambda\delta(x-a) - \lambda\delta(x+a) \right] \psi(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx E\psi(x).$$

Auflösen an der Stelle  $x_0 = a$  liefert:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(x) \right]_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} - \lambda\psi(a) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx E\psi(x) \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{d}{dx} \psi(a+\varepsilon) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(a-\varepsilon) \right] - \lambda\psi(a) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx E\psi(x) \end{aligned}$$

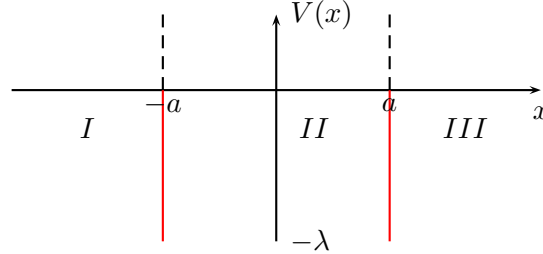
Das Integral  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx \psi(x)$  muss auf Grund der Stetigkeit verschwinden. Somit folgt also:

$$\frac{d}{dx} \psi(a+\varepsilon) - \frac{d}{dx} \psi(a-\varepsilon) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(a).$$

Für  $x_0 = -a$  ergibt sich analog:

$$\frac{d}{dx}\psi(-a + \varepsilon) - \frac{d}{dx}\psi(-a - \varepsilon) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(-a).$$

Wir wollen gebundene Zustände betrachten, d.h.  $E < -\lambda < 0$ . Wir betrachten folgende Skizze:



Innerhalb der Gebiete gibt es kein wirkendes Potential (also  $V(x) = 0$ ), dieses ist nur an den Stellen  $x_0 = \pm a$  vorhanden. Die Grenzen der Gebiete sind gegeben mit:

$$\begin{aligned} I & : -\infty < x < -a \\ II & : -a < x < a \\ III & : a < x < \infty \end{aligned}$$

Mit der Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{I,II,III}(x) = E \psi_{I,II,III}(x),$$

wählen wir den Ansatz  $\psi_{I,II,III}(x) = e^{\pm kx}$ . Da  $E < 0$  und  $V(x) = 0$  ist, befinden sich die Teilchen in klassisch verbotenen Gebieten, wenn sie sich nicht bei  $x_0 = \pm a$  aufhalten (daher keine Oszillation, sondern exponentieller Abfall). Dieser Ansatz liefert:

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Wir besitzen also folgende Wellenfunktionen, wobei wir davon ausgehen, dass ein Teilchen von einer der "Singularitäten" aus nach links und rechts exponentiell abnehmend "laufen" kann. Zudem können wir die Symmetrie ausnutzen, wobei sich die "Singularitäten" jeweils im Abstand  $a$  vom Ursprung befinden:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) & = A \cdot e^{kx} \\ \psi_{II}(x) & = C \cdot e^{kx} \pm D \cdot e^{-kx} \\ \psi_{III}(x) & = \pm E \cdot e^{-kx}. \end{aligned}$$

Die zwei Fälle, die durch die " $\pm$ " Zeichen entstehen, entsprechen den Paritäten, wobei wir feststellen können, dass aufgrund der Symmetrie  $A = \pm E$  und  $C = \pm D$  gelten

muss (aus  $\psi(x) = \psi(-x)$  und  $\psi(x) = -\psi(-x)$ ). Zudem können wir ausnutzen das die Wellenfunktionen nicht-normiert sein müssen, d.h. wir setzen  $A = 1$ . Somit folgt also:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= e^{kx} \\ \psi_{II}(x) &= C \cdot e^{kx} \pm C \cdot e^{-kx} \\ \psi_{III}(x) &= \pm e^{-kx}.\end{aligned}$$

Unter der Annahme das die Wellenfunktion und ihre Ableitung an den "Singularitäten"  $x_0 = \pm a$  stetig ist, wobei wir oben bereits eine Bedingung für diese hergeleitet haben, ergibt sich also folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}(I) \quad \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) &: e^{-ka} = C \cdot (e^{-ka} \pm e^{ka}) \\ (II) \quad \psi_{III}(a) = \psi_{II}(a) &: \pm e^{-ka} = C \cdot (e^{ka} \pm e^{-ka}) \\ (III) \quad \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) &: k \left( C \cdot e^{-ka} \mp C \cdot e^{ka} - e^{-ka} \right) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(-a) \\ (IV) \quad \psi_{III}(a) = \psi_{II}(a) &: k \left( \mp e^{-ka} - C \cdot e^{ka} \pm C \cdot e^{-ka} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \lambda \psi(a)\end{aligned}$$

Die Ableitungen folgen aus:

$$\begin{aligned}\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) &: \frac{d}{dx} \psi_{II}(-a) - \frac{d}{dx} \psi_I(-a) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(-a) \\ \psi_{III}(a) = \psi_{II}(a) &: \frac{d}{dx} \psi_{III}(a) - \frac{d}{dx} \psi_{II}(a) = -\frac{2m}{\hbar^2} \lambda \psi(a).\end{aligned}$$

Wir können erkennen das sowohl (I) und (II), als auch (III) und (IV) identisch sind, für (III) und (IV) folgt dies aus  $\pm\psi(-a) = \psi(a)$ , d.h. aus der Parität. Wir können also vereinfachen zu:

$$\begin{aligned}(I) &: \pm e^{-ka} = C \cdot (e^{ka} \pm e^{-ka}) \\ (III) &: k \left( C \cdot e^{-ka} \mp C \cdot e^{ka} - e^{-ka} \right) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(-a)\end{aligned}$$

Wir erhalten also aus umstellen von (I):

$$(I) : C = \pm \frac{e^{-ka}}{(e^{ka} \pm e^{-ka})} = \pm \frac{1}{(e^{2ka} \pm 1)}.$$

Dies können wir für die Wellenfunktionen der Gebiete einsetzen, somit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\psi_I(x) &= e^{kx} \\
\psi_{II}(x) &= \pm e^{-ka} \frac{e^{kx} \pm e^{-kx}}{(e^{ka} \pm e^{-ka})} = \frac{e^{-kx} \pm e^{kx}}{(e^{2ka} \pm 1)} \\
\psi_{III}(x) &= \pm e^{-kx}.
\end{aligned}$$

Weiterhin können wir  $C$  jetzt in (III) einsetzen und erhalten mit  $\psi(-a) = \frac{e^{ka} \pm e^{-ka}}{(e^{2ka} \pm 1)}$ :

$$\begin{aligned}
k \left( C \cdot \left( -e^{-ka} \pm e^{ka} \right) + e^{-ka} \right) &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \frac{e^{ka} \pm e^{-ka}}{(e^{2ka} \pm 1)} \\
k \cdot \frac{\pm 1}{(e^{2ka} \pm 1)} \left( -e^{-ka} \pm e^{ka} \right) &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \frac{e^{ka} \pm e^{-ka}}{(e^{2ka} \pm 1)} - \frac{ke^{-ka}}{(e^{2ka} \pm 1)} \left( e^{2ka} \pm 1 \right) \\
k \cdot \left( \mp e^{-ka} + e^{ka} \right) &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \left( e^{ka} \pm e^{-ka} \right) - k \left( e^{ka} \pm e^{-ka} \right) \\
\mp ke^{-ka} + ke^{ka} &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ka} \pm \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{-ka} - ke^{ka} \mp ke^{-ka} \\
2ke^{ka} &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ka} \pm \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{-ka} \\
2k &= \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \pm \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{-2ka} \\
\frac{\hbar^2}{m\lambda} k - 1 &= \pm e^{-2ka}
\end{aligned}$$

Wir erhalten also als Bedingung für die Energieeigenwerte:

$$\frac{\hbar^2}{m\lambda} k - 1 = \pm e^{-2ka}.$$

**b)**

Die graphische Auswertung ist im Anhang (mathematica printout) zu finden. Hierbei erkennen wir, dass es immer eine symmetrische, jedoch nicht immer eine antisymmetrische Lösung gibt. Zudem ist die maximale Anzahl an Schnittpunkten zwei, d.h. also es gibt nur maximal zwei Lösungen, wobei eine die symmetrische und die andere die antisymmetrische Lösung ist. Qualitativ können wir noch die groben Energieeigenwerte (für  $a \rightarrow \infty$ ) bestimmen, indem wir  $e^{-2ka} = 0$  setzen, mit dieser Abschätzung ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{m\lambda} k - 1 &= 0 \\
k &= \frac{m\lambda}{\hbar^2} \\
E &= -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2},
\end{aligned}$$

wobei  $k = \frac{m}{\hbar^2}\lambda$  uns erkennen lässt, dass mit größerem  $\lambda$  auch die Möglichkeit einer antisymmetrischen Lösung steigt, was sinnvoll ist. Betrachten wir  $\pm e^{-2ka}$ , so sehen wir das die Möglichkeit für die antisymmetrische Lösung durch größere  $a$ 's erhöht wird.

c)

Ausgehend von den Bedingungen für unsere Energieeigenwerte können wir umstellen:

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{m\lambda}k - 1 &= \pm e^{-2ka} \\ k &= \frac{m\lambda}{\hbar^2} \left(1 \pm e^{-2ka}\right),\end{aligned}$$

wir können  $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$  einsetzen und nach  $E$  umstellen:

$$E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} \left(1 \pm e^{-2ka}\right)^2,$$

für die Grenzwerte (wir betrachten beide nicht nur  $a \rightarrow \infty$ )  $a = 0$  und  $a \rightarrow \infty$  ergeben sich:

$$\begin{aligned}E(0) &= -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} (1 \pm 1)^2 = -\frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} \\ E(\infty) &= -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}\end{aligned}$$

wobei für den Fall  $a = 0$  nur die symmetrische Lösung gefunden werden kann, die antisymmetrische liefert eine 0 und für den Fall  $a \rightarrow \infty$  streben die symmetrische und antisymmetrische Lösung gegen denselben Grenzwert. Für den Fall  $a = 0$  besitzen wir sozusagen eine doppelte "Singularität" im Ursprung, für  $a = 0$  erhalten wir als Potential  $V(x) = -2\lambda\delta(x)$ .

## 11.2 (Teilchen im periodischen Potential)

$$V(x) = \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

a)

Das Potential ist periodisch  $V(x) = V(x + a)$ . Zwischen zwei Potentialspitzen ist  $V = 0$  und man kann für ein Intervall eine oszillierende Wellenfunktion ohne bevorzugte Richtung erwarten:

$$\begin{aligned}\varphi_n(x) &= A_n e^{i\kappa(x-na)} + B_n e^{-i\kappa(x-na)} \\ \Rightarrow \varphi'_n(x) &= i\kappa \left( A_n e^{i\kappa(x-na)} - B_n e^{-i\kappa(x-na)} \right) \\ \Rightarrow \varphi''_n(x) &= -\kappa^2 \left( A_n e^{i\kappa(x-na)} + B_n e^{-i\kappa(x-na)} \right)\end{aligned}$$

Wir integrieren die Schrödingergleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \right] \varphi(x) = E\varphi(x)$$

wieder über ein kleines Intervall  $[a - \varepsilon, a + \varepsilon]$  und nehmen die Wellenfunktion  $\varphi(x)$  als stetig und die 1. Ableitung bis auf endliche Sprünge als stetig an. Das ergibt:

$$\varphi'(a + \varepsilon) - \varphi'(a - \varepsilon) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \varphi(a)$$

Laut BLOCHSchem Theorem gilt:

$$\varphi_k(x + a) = e^{ika} \varphi_k(x)$$

oder, wenn wir diese  $n$  mal Anwenden

$$\varphi_k(x + na) = e^{ikna} \varphi_k(x).$$

Das heißt alle Teilabschnitte der Wellenfunktion unterscheiden sich von der bei  $n = 0$  nur um einen konstanten Phasenfaktor. Bestimmen wir also zunächst  $A_0$  und  $B_0$

Als Stetigkeitsbedingung haben wir angenommen

$$\begin{aligned} \varphi_0|_{x=a} &= \varphi_1|_{x=a} \\ \varphi_0'|_{x=a} &= \varphi_1'|_{x=a} - \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \varphi_1|_{x=a}. \end{aligned}$$

Setzen wir den Ansatz ein ergibt das

$$\begin{aligned} A_0 e^{i\kappa a} + B_0 e^{-i\kappa a} &= A_1 e^{i\kappa(a-a)} + B_1 e^{-i\kappa(a-a)} \\ i\kappa (A_0 e^{i\kappa a} + B_0 e^{-i\kappa a}) &= i\kappa (A_1 e^{i\kappa(a-a)} - B_1 e^{-i\kappa(a-a)}) - \frac{2m\lambda}{\hbar^2} (A_1 e^{i\kappa(a-a)} + B_1 e^{-i\kappa(a-a)}) \end{aligned}$$

Wenden wir nur also das BLOCHSche Theorem an, können wir alle Koeffizienten mit Index 1 loswerden und erhalten zwei lineare Gleichungen mit 2 Unbekannten.

$$\begin{aligned} A_0 e^{i\kappa a} + B_0 e^{-i\kappa a} &= e^{ika} (A_0 + B_0) \\ i\kappa (A_0 e^{i\kappa a} + B_0 e^{-i\kappa a}) &= i\kappa (A_0 - B_0) e^{ika} - \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ika} (A_0 + B_0). \end{aligned}$$

Diesen kann man nun noch durchsichtiger auschreiben: umgestellt nach  $A_0$  und  $B_0$ .

$$\begin{aligned} A_0 (e^{i\kappa a} - e^{ika}) + B_0 (e^{-i\kappa a} - e^{ika}) &= 0 \\ A_0 \left( i\kappa (e^{i\kappa a} - e^{ika}) + \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ika} \right) + B_0 \left( \kappa (e^{ika} - e^{-i\kappa a}) + \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ika} \right) &= 0 \end{aligned}$$

Dies erkennt man schnell als homogenes Gleichungssystem wieder. Damit es eindeutig lösbar ist, muss die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwinden.

$$\left(e^{i\kappa a} - e^{ika}\right) \left(i\kappa \left(e^{ika} - e^{-i\kappa a}\right) + \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ika}\right) = \left(e^{-i\kappa a} - e^{ika}\right) \left(i\kappa \left(e^{i\kappa a} - e^{ika}\right) + \frac{2m\lambda}{\hbar^2} e^{ika}\right)$$

Um diese Gleichung zu vereinfachen, sortieren wir nach Termen mit  $2m\lambda/\hbar^2$  und solche ohne und teilen alles durch  $i\kappa$

$$\left(e^{i\kappa a} - e^{ika}\right) \left(e^{ika} - e^{-i\kappa a}\right) + \left(e^{ika} - e^{-i\kappa a}\right) \left(e^{i\kappa a} - e^{ika}\right) = \underbrace{\left(-e^{i\kappa a} + e^{ika} + e^{-i\kappa a} - e^{ika}\right)}_{-2i \sin(\kappa a)} \frac{2m\lambda}{\hbar^2 i\kappa} e^{ika}$$

Links steht zweimal dasselbe. Also teilen wir durch 2 und multiplizieren aus.

$$e^{ia(\kappa+k)} - 1 - e^{i2ka} + e^{ia(k-\kappa)} = -2 \sin(\kappa a) \frac{m\lambda}{\hbar^2 \kappa} e^{ika}$$

Alles mit  $\exp(-ika)$  multiplizieren liefert:

$$\begin{aligned} -2 \sin(\kappa a) \frac{m\lambda}{\hbar^2 \kappa} &= e^{i\kappa a} - e^{-ika} - e^{ika} + e^{-i\kappa a} \\ &= \underbrace{e^{i\kappa a} + e^{-i\kappa a}}_{=2 \cos(\kappa a)} - \underbrace{(e^{ika} + e^{-ika})}_{=2 \cos(ka)}. \end{aligned}$$

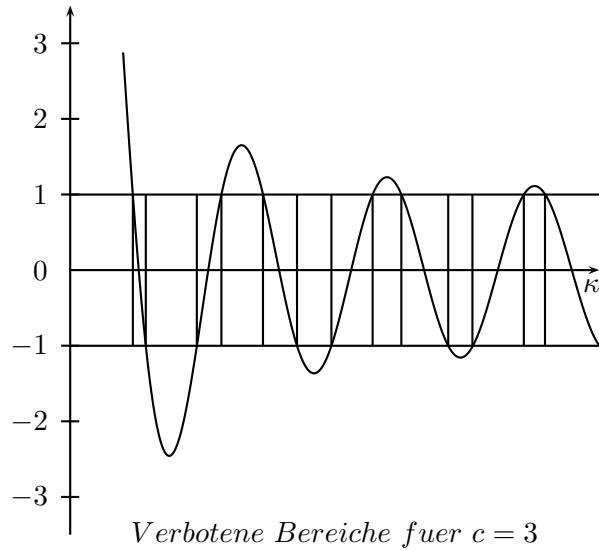
Das ergibt insgesamt:

$$\boxed{\cos(ka) = \cos(\kappa a) + \sin(\kappa a) \frac{m\lambda}{\hbar^2 \kappa}}$$

**b)+c)**

Wir bemerken gleich, dass die linke Seite nicht größer werden kann als 1. Im besten Falle, also für  $k = 0$  (genau dann, wenn der Phasenfaktor verschwindet) muss also stets gelten

$$\cos(\kappa a) + c \frac{\sin(\kappa a)}{\kappa} \leq 1 \quad c = \frac{m\lambda}{\hbar^2}.$$



Betrachten wir noch einmal unseren Ansatz. Danach ist

$$\varphi''(x) = -\kappa^2 \varphi(x).$$

Setzen wir das in die stationäre Schrödingergleichung ein, erhalten wir

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$$

also  $E \propto \kappa^2$ . Das heisst gerade für kleine Energien ( $\kappa$  klein) gibt es größere Bereiche in denen diese Bedingung verletzt ist. Die verbotenen Bereiche sind auch umso breiter, je größer  $\lambda$  ist, sprich je mächtiger die Potentialspitzen sind. Für  $\lambda \rightarrow 0$  kann die Bedingung immer erfüllt werden. Was auch einleuchtet, da wir hier wieder eine stationäre Welle ohne Potential haben. Umgekehrt wird der Term  $c \sin(\kappa a) / \kappa$  für große  $\kappa$ , also für große Energien, immer kleiner.