Quantenmechanik

David Gross, Johan Åberg

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln

WS 24/25

Übungsblatt 3 Abgabe: Samstag den 26. Oktober um 24:00 Uhr

1 Modell eines Atoms

Das Thema dieses Zettels ist das Spektrum eines Hamiltonians, das, wie in der Vorlesung gezeigt wurde, sowohl diskret als auch kontinuierlich sein kann. Als Beispiel für ein kontinuierliches Spektrum wurde das Stufen-Potential besprochen und als Beispiel für ein diskretes Spektrum der unendlich tiefe Potentialtopf. In dieser Aufgabe werden Sie sich mit Potentialen beschäftigen, die beide Arten von Spektren haben. Auf Grund dieser Tatsache bieten diese Potentiale realistische Modelle für Atome und Moleküle.[1] Die Rechnungen folgen den gleichen Prinzipien wie in der Vorlesung, sind jedoch etwas involvierter. Insbesondere wird es nicht möglich sein, die diskreten Energielevel explizit zu bestimmen (im Kontrast zum unendlich tiefen Potentialtopf). Stattdessen müssen Sie sich mit einer Gleichung, welche die Eigenwerte implizit bestimmt (numerisch), begnügen.

a) Erinnern Sie sich daran, dass die Energie eines Teilchens durch $(H\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) + V(x)\phi(x)$ gegeben ist und, dass die dazugehörige Eigenwert-Gleichung (zeitunabhängige Schrödingergleichung) wie folgt definiert ist

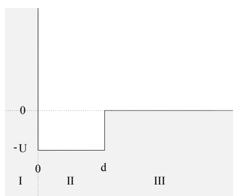
$$E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) + V(x)\phi(x). \tag{1}$$

Betrachten Sie nun den Fall in dem das Potential konstant ist, d. h., $V(x) = V_0$. Für die Gleichung (1) kann folgender Ansatz gemacht werden

$$\varphi(x) = Ce^{\xi x},$$

wobei ξ und C *komplexe Zahlen* sind. Betrachten Sie die beiden Fälle[2] $E > V_0$ und $E < V_0$. *Bestimmen Sie für jeden Fall alle möglichen Werte von ξ. Sind diese reell oder imaginär?* **(2 Punkte)**

b) Stückweise Lösung für $E > 0$: Im folgenden wenden Sie sich einem spezifischen Beispiel zu und zwar dem Potential, welches gegeben ist durch



$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 & & \text{("Region I")} \\ -U & 0 \le x \le d, & U > 0, \quad d > 0 & \text{("Region II")} \\ 0 & d < x & & \text{("Region III")} \end{cases} \tag{2}$$

Hier wird jetzt der erste Schritt gemacht um zu zeigen, dass alle Energien $E > 0$ Eigenwerte von (1) sind. Aus der Vorlesung wissen Sie, dass in Region I, wo das Potential unendlich ist, folgendes gilt

$$\text{Region I:} \quad \phi_I(x) = 0 \quad \text{for} \quad x < 0,$$

[1] In einem Atom können Elektronen in diskreten Energie-Niveaus gebunden sein. Allerdings kann das Atom auch ionisiert werden, d. h., dass eins odere mehrere Elektronen aus dem Atom herauswandern. Das besagte Elektron kann eine beliebige Geschwindigkeit und somit auch eine beliebige kinetische Energie haben. Dies korrespondiert dann zu einem Kontinuum im Spektrum.

[2] Ignorieren Sie den Fall $E = V_0$.

aber was passiert in den anderen Regionen? *Argumentieren Sie, dass die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung* (1) *in den Regionen I und II folgende Form haben*

$$\begin{array}{lll} \text{Region II:} & \phi_{II}(x) = Ae^{iax} + Be^{-iax}, & \text{for} \quad 0 \le x \le d \\ \text{Region III:} & \phi_{III}(x) = Ce^{icx} + De^{-icx}, & \text{for} \quad d < x \end{array}$$

und bestimmern Sie die Konstanten $a > 0$ und $c > 0$ in Abhängigkeit von E, m, U (and $\hbar$). Hier sind A, B, C, D freie komplexe Parameter.

Hinweis: Es gibt natürlich einen Grund dafür warum Sie Aufgabenteil a) (hoffentlich) gemacht haben. **(4 Punkte)**

c) Übergang an den Schnittstellen: *Wenden Sie für den Fall von b) die entsprechenden Randbedingungen an um zu zeigen, dass*

$$\begin{aligned} B &= -A, \\ C &= e^{-icd}\big(i\sin(ad) + \frac{a}{c}\cos(ad)\big)A, \\ D &= e^{icd}\big(i\sin(ad) - \frac{a}{c}\cos(ad)\big)A. \end{aligned}$$

Hinweis: Beachten Sie, dass das Potential (3) eine Kombination von einigen Aspekten der Potential-Barriere und einigen Aspekten des unendlich tiefen Potentialtopfes ist. Schauen Sie in den Vorlesungsnotizen nach wie man den Übergang and den Schnittstellen jeweils für einen unendlich tiefen Potentialtopf und für eine unendliche Potential-Barriere macht. **(4 Punkte)**

d) Nun sind Sie endlich an dem Punkt zu zeigen, dass jede Energie $E > 0$ ein Eigenwert ist. *Konstruieren Sie für jedes $E > 0$ eine Wellenfunktion ϕ_E, welche die Gleichung* (1) *löst. Dies bedeutet konkret, dass Sie die unten stehenden Fragezeichen ausfüllen müssen.*

$$\phi_E(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ ??? & 0 \le x \le d, \\ ??? & d < x. \end{cases} \tag{3}$$

(2 Punkte)

e) Stückweise Lösung für $-U < E < 0$: Nun wenden Sie sich dem Fall $-U < E < 0$ zu. Wieder ist das Ziel das Spektrum zu verstehen. Der erste Schritt ist analog zu dem was Sie in b) gemacht haben. *Argumentieren Sie, dass die Lösungen zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung* (1) *in den Regionen I und II folgende Form annehmen*

$$\begin{array}{lll} \text{Region II:} & \phi_{II}(x) = Ae^{iax} + Be^{-iax}, & \text{for} \quad 0 \le x \le d \\ \text{Region III:} & \phi_{III}(x) = Ce^{-bx}, & \text{for} \quad d < x \end{array} \tag{4}$$

und bestimmen Sie die Konstanten $a > 0$ und $b > 0$ in Abhängigkeit von E, m, U, q (und $\hbar$).

Hinweis: Warum gibt es keinen Term De^{bx} in (4)? **(4 Punkte)**

f) Übergang an den Schnittstellen: *Zeigen Sie für den Fall in e), dass*

$$\phi_E(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ \phi_{II}(x) & 0 \le x \le d, \\ \phi_{III}(x) & d < x \end{cases}$$

eine Lösung für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (1) *ist genau dann, wenn*

$$-\tan\left(d\sqrt{\frac{2m(U-|E|)}{\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{U-|E|}{|E|}}. \tag{5}$$

Erinnern Sie sich daran, dass E negativ ist, da $-U < E < 0$.

Hinweis: Gehen Sie vor wie in c) um Gleichungen zu erhalten, welche A, B und C miteinander in Beziehung setzen. Nutzen Sie diese Gleichungen um A, B und C zu eliminieren. **(4 Punkte)**

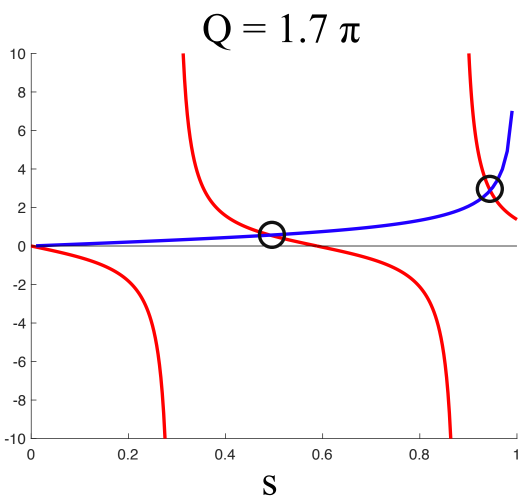
Bemerkung: Sie haben gezeigt, dass eine Energie E (im Intervall $-U < E < 0$) nur dann eine Eigenwert zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung sein kann, wenn er Gleichung (5) erfüllt. Unglücklicherweise, gibt es keine Möglichkeit die Gleichung (5) analytisch zu lösen. Dafür können die Nullstellen numerisch gefunden werden um ein qualitatives Verständnis zu erlangen. Für beide Fälle ist es nützlich (5) in eine äquivalente Form zu bringen. Mit

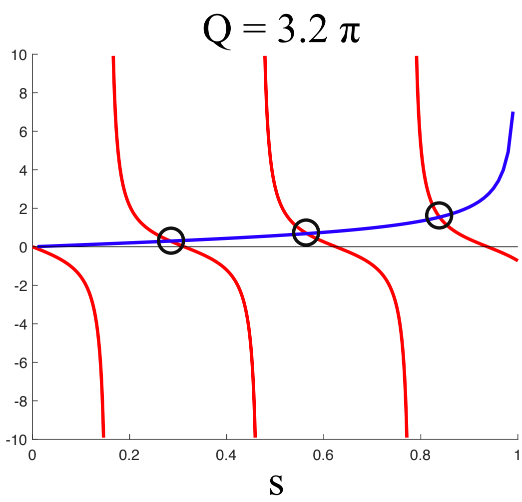
$$s = \sqrt{1 - \frac{|E|}{U}} \tag{6}$$

kann man (5) umformen zu

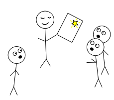
$$-\tan(Qs) = \frac{s}{\sqrt{1-s^2}}, \quad Q = \sqrt{\frac{2md^2U}{\hbar^2}},$$

wobei $0 < s < 1$ folgt, da $-U < E < 0$. Durch diese Umformung sieht man direkt, dass die Anzahl der Lösungen lediglich durch Q bestimmt ist. Darüber hinaus, sind die erlaubten Energien durch die Punkte an denen die Graphen von $-\tan(Qs)$ und $\frac{s}{\sqrt{1-s^2}}$ sich schneiden gegeben. Die roten Linien in den Abbildungen unten korrespondieren zu $-\tan(Qs)$, wohingegen die blauen Linien zu $\frac{s}{\sqrt{1-s^2}}$ gehören. Zur Linken ist ein Plot für $Q = 1.7\pi$ und zur Rechten ist ein Plot für $Q = 3.2\pi$. Beachten Sie, dass $-\tan(Qs)$ eine periodische Funktion ist und, dass je größer Q ist, desto kürzer ist die Periode (desto mehr Eigenwerte gibt es). Für jede Nullstelle s_{root} (die eingekreisten Schnittstellen) folgt durch (6), dass der dazugehörige Eigenwert durch $E = -U(1 - s_{\text{root}}^2)$ gegeben ist. Jeder dieser diskreten Eigenwerte gehört zu einem Eigenzustand, in dem das Teilchen in einem Potentialtopf gebunden ist (obwohl es einen exponentiell fallenden Teil Ce^{-bx} gibt, der aus dem Topf rausgeht). Im Kontrast dazu, korrespondiert das Kontinuum $E > 0$ zu einem Zustand, in dem das Teilchen frei ist; aus dem Unendlichen hereinkommt und dann wieder raus geht.





g) Goldstar-Übung Diese Übung gibt keine Punkte! Allerdings wird Sie die Lösung dieses Problems natürlich zum Zentrum der Bewunderung und des Neids all ihrer Kommilitonen machen. Darüber hinaus wird sich Ihre Famlie ganz offenkundig für mindestens drei Generationen in grenzenlosem Ruhm sonnen. Sie sollten sich also gut überlegen, ob Sie sich diese einmalige Chance entgehenlassen wollen!



Was ist der größte Wert für Q *unter welchem es keinen Eigenwert* E *im the Energie-Intervall* $-U < E < 0$ *gibt?*

Hinweis: Was passiert an der Schnittstelle, wenn Q abnimmt? Ignorieren sie die Nullstelle bei $s = 0$ (welche zu $E = -U$ korrespondiert). **(0 Punkte)**

Bemerkung: Das bedeutet, dass für solch ein Q, das Potential zu flach und zu schmal (und das Teilchen zu leicht) ist, um einen gebunden Zustand zu ermöglichen. Das Teilchen kann sozusagen nicht eingefangen werden. Dies steht im Kontrast zum klassischen Modell, bei dem das Teilchen immer im Potentialtopf gefangen werden kann, wenn seine Energie gering genug ist.