1. Plenum – Potentialtopf

Gegeben sei ein Kastenpotential der Breite L:

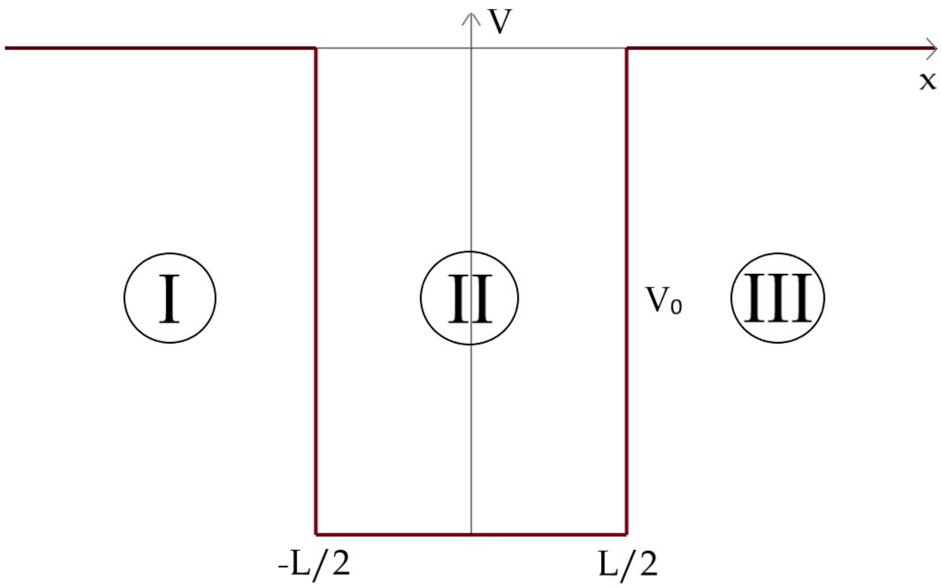
$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| \leq L/2 \\ 0 & |x| > L/2 \end{cases}$$

Dabei sei V_0 eine positive Konstante. Berechnen Sie die Eigenzustände $\psi_n(x)$ und die dazugehörigen Eigenenergien E_n als Lösung der stationären Schrödingergleichung

$$H\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

für $E < 0$ (gebundene Zustände). Geben Sie – in Abhängigkeit von V_0 und L – die maximale Zahl der gebundenen Zustände an.

Um diese Aufgabe zu lösen, machen wir uns zunächst zunutze, dass wir das Problem auf drei verschiedene Bereiche aufteilen können, wie in der Grafik dargestellt ist. Diese können wir nun unabhängig voneinander lösen und erhalten daraus Stetigkeitsbedingungen an den Grenzflächen bei $x = \pm L/2$.



Bereich I ($-\infty < x < -L/2$)

Hier ist $V(x) = 0$ und die Schrödingergleichung lautet somit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_I(x)}{\partial x^2} = E\psi_I(x) \Rightarrow \frac{\partial^2\psi_I(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x) = k^2\psi_I(x), \text{ mit } k := \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}$$

Die Lösung einer Differentialgleichung dieser Form ist bekannt und gegeben durch

$$\psi_I(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx},$$

wobei A und B zunächst beliebige Konstanten sind. Da die Lösung normierbar sein muss und sich in diesem Fall der Integrationsbereich für die Normierung bis $-\infty$ erstreckt, muss die Konstante B verschwinden und wir können schreiben:

$$\psi_I(x) = Ae^{kx} \tag{2}$$

Bereich II $(-L/2 \leq x \leq -L/2)$

In diesem Bereich gilt $V(x) = -V_0$ und wir können daher schreiben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{II}(x)}{\partial x^2} = (E+V_0)\psi_{II}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2\psi_{II}(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi_{II}(x) = -k'^2\psi_{II}(x),$$

wobei hier $E > -V_0$ sein muss, da die kinetische Energie sicherlich positiv und die Gesamtenergie somit größer als die potentielle Energie ist. Somit gilt:

$$k' := \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \in \mathbb{R},$$

wobei wir nun durch das negative Vorzeichen in der Differentialgleichung für $\psi_{II}(x)$ ein komplexes anstatt eines reellen Arguments für die Exponentialfunktion erhalten – was also bedeutet, dass die Lösungen die Form von Schwingungen anstelle eines exponentiellen Abfalls aufweisen. Die Lösung lautet daher:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \tag{3}$$

Wieder sind C und D a priori beliebige Kontanten, deren Zusammenhang sich aus den Stetigkeitsbedingungen ergeben wird.

Bereich III $(L/2 < x < \infty)$

Die Lösung in diesem Abschnitt ist beinahe analog zu Bereich I. Wieder lautet die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{III}(x)}{\partial x^2} = E\psi_{III}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2\psi_{III}(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{III}(x) = k^2\psi_{III}(x)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi_{III}(x) = Ee^{kx} + Fe^{-kx}$$

Das Integral für die Normierung läuft hier jedoch bis $+\infty$ und wir müssen aufgrund der Normierbarkeit den Koeffizienten E Null setzen. Somit gilt:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{-kx} \tag{4}$$

Stetigkeitsbedingungen

Wir haben nun Wellenfunktionen gefunden, die in ihren jeweiligen Bereichen stetig sind. Von vornherein ist jedoch nicht klar, dass an $x = \pm L/2$ die Gesamtwellenfunktion keinen Sprung machen darf. Betrachten wir jedoch die Schrödingergleichung (1) in der Form

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi(x)$$

und stellen uns vor, dass die Wellenfunktion an den Wänden des Potentialtopfes einen Sprung macht, so stünde auf der rechten Seite der Gleichung eine Größe, die maximal Heavisidefunktionen beinhalten kann (aufgrund des Sprungs im Potential bzw. der Wellenfunktion selbst), links jedoch eine Größe mit δ'-Abhängigkeit (als zweite Ableitung einer Sprungfunktion). Diese δ'-Abhängigkeit würde in der Gleichung durch nichts kompensiert und somit müssen sowohl die Wellenfunktion als auch deren Ableitung an den Potentialwänden stetig sein.

Mit den Gleichungen (2), (3) und (4) folgt daher:

$$\psi_I\left(-\frac{L}{2}\right) \overset{!}{=} \psi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \Rightarrow Ae^{-\frac{kL}{2}} = Ce^{-\frac{ik'L}{2}} + De^{\frac{ik'L}{2}} \tag{5}$$

$$\psi'_I\left(-\frac{L}{2}\right) \overset{!}{=} \psi'_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \Rightarrow kAe^{-\frac{kL}{2}} = ik'\left(Ce^{-\frac{ik'L}{2}} - De^{\frac{ik'L}{2}}\right) \tag{6}$$

$$\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) \overset{!}{=} \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \Rightarrow Ce^{\frac{ik'L}{2}} + De^{-\frac{ik'L}{2}} = Fe^{-\frac{kL}{2}} \tag{7}$$

$$\psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) \overset{!}{=} \psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \Rightarrow ik'\left(Ce^{\frac{ik'L}{2}} - De^{-\frac{ik'L}{2}}\right) = -kFe^{-\frac{kL}{2}} \tag{8}$$

Mit Hilfe dieses Gleichungssystems lassen sich nun die Koeffizienten miteinander in Verbindung bringen. Dividieren wir Gleichung (6) durch k und setzen in Gleichung (5) ein, so können wir den Koeffizienten A eliminieren und erhalten:

$$\begin{aligned} Ce^{-\frac{ik'L}{2}} + De^{\frac{ik'L}{2}} &= \frac{ik'}{k}\left(Ce^{-\frac{ik'L}{2}} - De^{\frac{ik'L}{2}}\right) \\ \Rightarrow Ce^{-\frac{ik'L}{2}}\left(1 - \frac{ik'}{k}\right) &= -De^{\frac{ik'L}{2}}\left(1 + \frac{ik'}{k}\right) \end{aligned} \tag{9}$$

Gleichermaßen können wir mit den Gleichungen (7) und (8) vorgehen, wobei wir auf folgendes Zwischenergebnis kommen:

$$\begin{aligned} Ce^{\frac{ik'L}{2}} + De^{-\frac{ik'L}{2}} &= -\frac{ik'}{k}\left(Ce^{\frac{ik'L}{2}} - De^{-\frac{ik'L}{2}}\right) \\ \Rightarrow Ce^{\frac{ik'L}{2}}\left(1 + \frac{ik'}{k}\right) &= -De^{-\frac{ik'L}{2}}\left(1 - \frac{ik'}{k}\right) \end{aligned} \tag{10}$$

Dividieren wir Gleichung (9) durch D und setzen in Gleichung (10) ein, so ergibt sich:

$$\frac{C^2}{D}e^{-\frac{ik'L}{2}}\left(1 - \frac{ik'}{k}\right) = De^{-\frac{ik'L}{2}}\left(1 - \frac{ik'}{k}\right) \Rightarrow C^2 = D^2 \Rightarrow C = \pm D$$

Das ist auch keine große Überraschung, da aufgrund der Symmetrie des Potentials nur völlig symmetrische oder antisymmetrische Wellenfunktionen in Frage kommen. Setzen wir in den Ansatz für die Wellenfunktion $\psi_{II}(x)$ in Gleichung (3) ein, so erhalten wir:

$$\psi_{II}^{\pm}(x) = C\left(e^{ik'x} \pm De^{-ik'x}\right) \Rightarrow \psi_{II}^{+} = 2C\cos(k'x),\ \psi_{II}^{-} = 2iC\sin(k'x)$$

Diese Lösungen existieren allerdings nur unter gewissen Voraussetzungen, die von der Tiefe des Potentialkastens sowie von seiner Länge abhängen werden. Diese Bedingungen erhalten wir, wenn wir noch einmal einen genaueren Blick auf die Stetigkeitsbedingungen werfen. Wir unterscheiden nun zwischem den beiden Fällen $C = \pm D$, also zwischen symmetrischem und antisymmetrischem Fall.

Symmetrischer Fall ($C = D$)

Hier lauten die Stetigkeitsbedingungen:

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = 2C\cos\left(-\frac{k'L}{2}\right) \tag{11}$$

$$kAe^{-\frac{kL}{2}} = -2k'C\sin\left(-\frac{k'L}{2}\right) \tag{12}$$

Dividieren wir Gleichung (12) durch Gleichung (11), so erhalten wir

$$k = -k'\tan\left(-\frac{k'L}{2}\right) = k'\tan\left(\frac{k'L}{2}\right)$$

Dies ist eine implizite Gleichung für k und k' (und da beide von der Energie abhängen, auch für E), die analytisch nicht lösbar ist. Wir können also nicht explizit nach den Eigenenergien auflösen, sondern können sie bei gegebener Potentialtiefe und -breite nur numerisch lösen. Allerdings schaffen wir es, wie wir ein wenig weiter unten sehen werden, einen analytischen Ausdruck für die Zahl der gebundenen Zustände in Abhängigkeit der Potentialform anzugeben.

Wir müssen noch sichergehen, dass wir auch nur k- und k'-Werte berücksichtigen, die unseren physikalischen Annahmen entsprechen. Insbesondere haben wir für gebundene Zustände herausgefunden, dass sowohl k als auch k' stets positiv sind. Der Tangens ist eine π-periodische Funktion, welcher jedoch nur in Intervallen mit $(n-1)\pi \leq x < (n-1/2)\pi$, wobei $n \in \mathbb{N}$, positive Werte liefert. Die Energieeigenwerte sind somit quantisiert und es gilt:

$$k_n = k_n'\tan\left(\frac{k_n'L}{2}\right), \quad (n-1)\pi \leq x < (n-1/2)\pi \tag{13}$$

Antisymmetrischer Fall ($C = -D$)

In diesem Fall sind die Stetigkeitsbedingungen gegeben über

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = 2iC\sin\left(-\frac{k'L}{2}\right) \tag{14}$$

$$kAe^{-\frac{kL}{2}} = 2ik'C\cos\left(-\frac{k'L}{2}\right) \tag{15}$$

Wieder dividieren wir die beiden Gleichungen (15) und (14) durcheinander und erhalten für diesen Fall:

$$k = k'\cot\left(-\frac{k'L}{2}\right) = -k'\cot\left(\frac{k'L}{2}\right)$$

Wieder dürfen wir für k und k' nur positive Werte erhalten. Da der Cotangens nichts anderes ist als der Kehrwert des Tangens, weist auch dieser dieselbe Periodizität bezüglich positiven und negativen Funktionswerten wie der Tangens auf. Da nun allerdings ein negatives Vorzeichen auf der rechten Seite der Gleichung steht, müssen wir nur diejenigen Bereiche betrachten, wo der Cotangens negativ ist. Dies ist für $(n - 1/2)\pi \leq x < n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$ gegeben. Somit gilt für den asymmetrischen Fall:

$$k_n = -k'_n\cot\left(\frac{k'_nL}{2}\right), \quad (n - 1/2)\pi \leq x < n\pi \tag{16}$$

Wenn wir die beiden impliziten Gleichungen (13) bzw. (16) auf beiden Seiten mit $L/2$ erweitern und dimensionslose Koordinaten gemäß

$$\eta_n := \frac{k_nL}{2}, \quad \eta'_n := \frac{k'_nL}{2}$$

einführen, so lassen sich die beiden Gleichungen schreiben als

$$\eta_n = \begin{cases} \eta'_n\tan(\eta'_n), & (n-1)\pi \leq x < (n-1/2)\pi \\ -\eta'_n\cot(\eta'_n), & (n-1/2)\pi \leq x < n\pi \end{cases}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Nun verwenden wir noch, dass wir k und k' und somit η und η' in Beziehung setzen können:

$$k^2 + k'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow \eta^2 + \eta'^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{L^2}{4} =: \eta_0^2$$

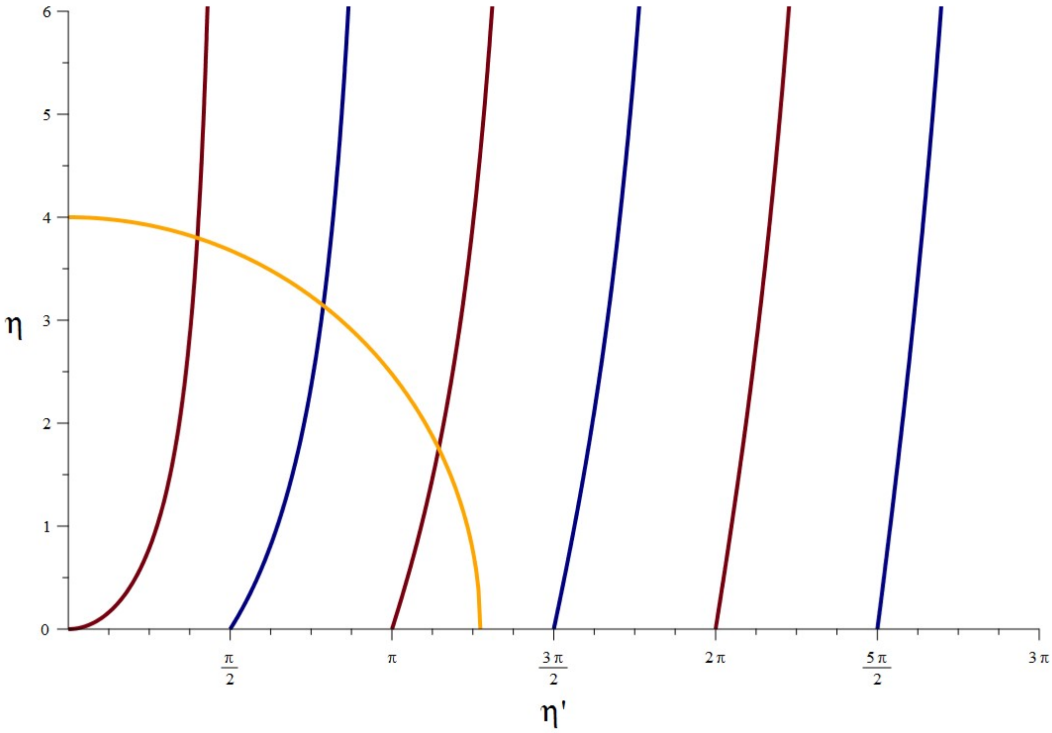
Somit können wir η_n ausdrücken:

$$\eta_n = \sqrt{\eta_0^2 - \eta_n'^2}$$

Schließlich erhalten wir für die beiden impliziten Gleichungen:

$$\sqrt{\eta_0^2 - \eta_n'^2} = \begin{cases} \eta'_n\tan(\eta'_n), & (n-1)\pi \leq x < (n-1/2)\pi \\ -\eta'_n\cot(\eta'_n), & (n-1/2)\pi \leq x < n\pi \end{cases}, \quad n \in \mathbb{N}$$

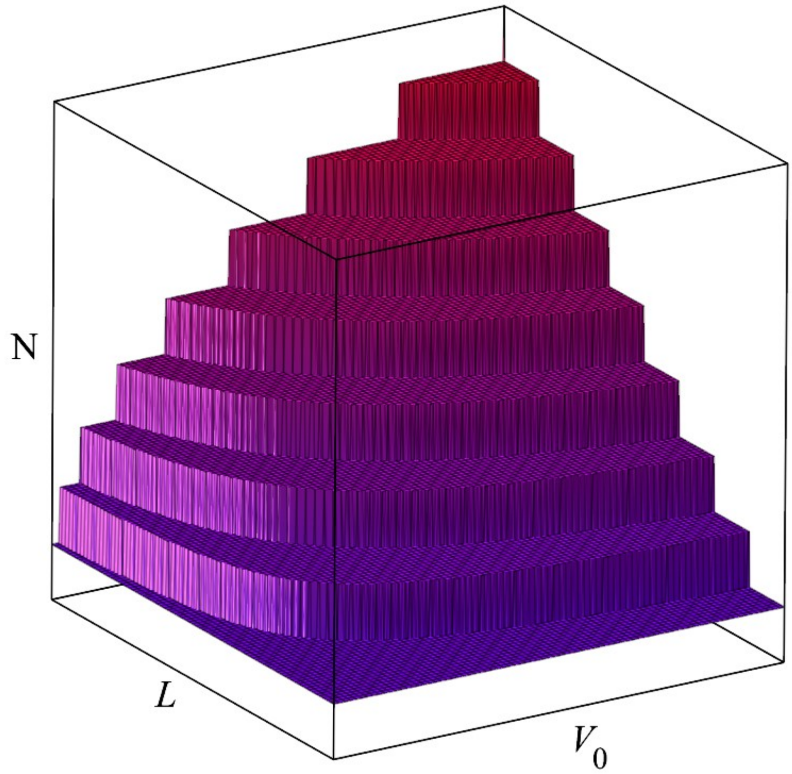
Sieht man linke wie rechte Seite als Funktion von η'_n, so erkennt man, dass es sich bei der linken Seite um die Gleichung eines Viertelkreises im ersten Quadranten handelt. Dieser Viertelkreis hat den Radius η_0, wovon man sich leicht überzeugen kann, wenn man $\eta'_n = 0$ setzt. Rechts wiederum alternieren die beiden trigonometrischen Funktionen, die jeweils noch mit der Variablen multipliziert werden. Da der Viertelkreis für $\eta'_n > 0$ eine streng monoton fallende und die Äste der rechten Seite jeweils streng monoton steigende Funktionen sind, ergibt sich mit jedem der Äste maximal ein Schnittpunkt. Dies ist auch in der folgenden Abbildung zu erkennen.



In Orange ist der Viertelkreis eingezeichnet, in Rot die Funktion $\eta' \tan(\eta')$ und in Blau $-\eta' \cot(\eta')$. Wollen wir also wissen, wie viele gebundene Zustände im Potentialtopf Platz haben, so müssen wir nur die Schnittpunkte des Viertelkreises mit den jeweiligen Ästen abzählen. Da der Radius des Viertelkreises η_0 beträgt und die Breite der Äste jeweils $\pi/2$, können wir die Zahl der Zustände als ganzzahligen Anteil deren Quotients schreiben (wir sehen also nach, bis wohin der Viertelkreis reicht und wieviele Äste bis dorthin Platz finden):

$$N = 1 + \left\lfloor \frac{2\eta_0}{\pi} \right\rfloor = 1 + \left\lfloor \sqrt{\frac{2mV_0L^2}{\pi^2\hbar^2}} \right\rfloor$$

Wir sehen, dass im endlichen Potentialtopf stets mindestens ein Zustand möglich ist. Dieser entspricht dem Grundzustand des symmetrischen Falles. Es wird aufgrund dieser Überlegungen auch klar, dass danach die Zustände immer abwechselnd von antisymmetrischen bzw. symmetrischen Wellenfunktionen aufgefüllt werden. In der folgenden Abbildung erkennt man die Abhängigkeit der Zahl der Zustände als Funktion von V_0 und L.



Es wird klar, dass die Zahl der Zustände mit steigendem V_0 und L stetig ansteigt. Für konstantes V_0 ist die Einhüllende eine lineare Funktion in L, für konstantes L hingegen eine Wurzelfunktion in V_0. Insgesamt lässt sich jedoch resümieren: je größer (also je tiefer und breiter) der Potentialtopf, desto mehr gebundene Zustände sind möglich. Die Form dieser gebundenen Zustände können wir nun bestimmen. Hierbei unterscheiden wir wieder zwischen dem symmetrischen und dem antisymmetrischen Fall.

Wellenfunktionen im symmetrischen Fall

Hier ergibt sich aus der Stetigkeitsbedingung in Gleichung (11):

$$C = \frac{Ae^{-\frac{kL}{2}}}{2\cos\left(\frac{k'L}{2}\right)}$$

und aufgrund der Symmetrie der Wellenfunktion bzw. aus der Stetigkeitsbedingung an der anderen Potentialwand folgt:

$$A = F$$

Die Wellenfunktionen lassen sich nun anschreiben als

$$\psi_n^+(x) = \begin{cases} Ae^{k_n x}, & -\infty < x < -L/2 \\ Ae^{-\frac{k_n L}{2}} \frac{\cos(k_n' x)}{\cos\left(\frac{k_n' L}{2}\right)} & -L/2 \le x \le L/2 \\ Ae^{-k_n x}, & L/2 < x < \infty \end{cases}$$

Die Konstante A ist schließlich für jeden Energiezustand aus der Normierung bestimmbar, dies ist aber aufgrund der Tatsache, dass wir die Energiezustände nur numerisch berechnen können, ebenfalls numerisch zu bewältigen.

Wellenfunktionen im antisymmetrischen Fall

In diesem Fall liefert Gleichung (14):

$$C = -\frac{Ae^{-\frac{kL}{2}}}{2i\sin\left(\frac{k'L}{2}\right)}$$

Die Antisymmetrie der Wellenfunktion bzw. die Stetigkeitsbedingung am anderen Ende des Potentialtopfs verlangen zudem:

$$A = -F$$

Somit werden die antisymmetrischen Wellenfunktionen zu

$$\psi_n^-(x) = \begin{cases} Ae^{k_n x}, & -\infty < x < -L/2 \\ -Ae^{-\frac{k_n L}{2}} \frac{\sin(k'_n x)}{\sin\left(\frac{k'_n L}{2}\right)} & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ -Ae^{-k_n x}, & L/2 < x < \infty \end{cases}$$

Wieder lässt sich die Normierungskonstante nur numerisch bestimmen.