

Kapitel 6

Eindimensionale Systeme

Es ist schön zu wissen, dass der Computer das Problem versteht. Aber ich würde es auch gerne verstehen.

E. Wigner; Nobelpreis 1963

In diesem Kapitel untersuchen wir die Lösungen der stationären Schrödingergleichung für eindimensionale Systeme mit Potentialkräften. Sie sind auch deshalb interessant, weil sie nichtklassische Effekte wie zum Beispiel den Tunneleffekt beschreiben. Außerdem sind viele physikalische Systeme aufgrund ihrer Symmetrie praktisch eindimensional, obwohl wir in einer dreidimensionalen Welt leben.

6.1 Potentialprobleme

Für viele Systeme lässt sich die zeitunabhängige Schrödingergleichung durch Separationsansätze auf 1-dimensionale Differentialgleichungen reduzieren. Ein prominentes Beispiel ist das Wasserstoffatom. Im Allgemeinen wird der Konfigurationsraum des reduzierten Systems aber nur eine Teilmenge der reellen Achse sein. Wir wollen deshalb annehmen, dass die Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung Elemente des Hilbertraums $L_2(\rho dq, I)$ sind. Dieser besteht aus den im Intervall $I \subset \mathbb{R}$ bezüglich des Maßes $\rho(q) dq$ mit $\rho > 0$ quadratintegrierbaren Funktionen und trägt das Skalarprodukt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_I \bar{\phi}(q) \psi(q) \rho(q) dq. \quad (6.1)$$

Das Potential sei zeitunabhängig, $V = V(q)$. In diesem Abschnitt wollen wir nun die wichtigsten Eigenschaften der eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$H\psi = -\frac{1}{\rho}(A\psi')' + V\psi = E\psi \quad (6.2)$$

mit reellen und positiven Funktionen $\rho(x)$ und $A(x)$ diskutieren. Der Hamiltonoperator H in (6.2) ist hermitesch, falls

$$(\phi, H\psi) - (H\phi, \psi) = \int_I \rho (\bar{\phi} H\psi - \overline{H\phi} \psi) dq = (-\bar{\phi} A\psi' + \bar{\phi}' A\psi) \Big|_{L_1}^{L_2} = 0,$$

gilt, wobei der Strich die q -Ableitung bezeichnet. Hier sind $L_1 < L_2$ die Grenzen des Quantisierungsintervalls I . Wir sehen, dass der Hamiltonoperator hermitesch ist, wenn

- die Funktionen an den Enden des Intervalls verschwinden. Dies sind die sogenannten *Dirichlet-Randbedingungen*. Sie können durch unendlich hohe Potentialbarrieren „realisiert“ werden.
- die ersten Ableitungen der Funktionen an den Enden des Intervalls verschwinden. Dies sind die *Neumann-Randbedingungen*.

6.2 Knotensatz

Die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung (6.2) ist reell und deshalb können die Eigenfunktionen von H in (6.2) reell gewählt werden, da Realteil und Imaginärteil jeder Lösung ebenfalls Lösungen sind. Wir wollen ein stetiges Potential voraussetzen. Dann sind die Lösungen differenzierbar. Wir definieren nun die *Wronski-Determinante* für zwei Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung gemäß

$$W(\phi, \psi) = A(\phi\psi' - \phi'\psi), \quad A(x) > 0. \quad (6.3)$$

Es seien ϕ und ψ Eigenfunktionen mit Eigenwerten E_ϕ und E_ψ . Nun ist offensichtlich

$$W' = \phi(A\psi')' - (A\phi')'\psi \stackrel{(6.2)}{=} \rho\phi\psi(E_\phi - E_\psi). \quad (6.4)$$

Sei weiter $E_\psi < E_\phi$ und q^1 und q^2 zwei benachbarte Nullstellen der Lösung ψ , die zwischen den beiden Nullstellen positiv sei. Nun integrieren wir (6.4) vom Knoten q^1 bis zum Knoten

q^2 mit dem Resultat

$$W|_{q^1}^{q^2} = A\phi\psi'|_{q^1}^{q^2} = (E_\phi - E_\psi) \int \rho\phi\psi dq. \quad (6.5)$$

Für eine im betrachteten Intervall positive Lösung ψ ist $(E_\phi - E_\psi)\psi$ positiv, $\psi'(q^2)$ negativ und $\psi'(q^1)$ positiv, wie in der Abbildung 6.1 angedeutet. Wir haben hier angenommen, dass die Steigung einer Lösung bei den Knoten nicht verschwindet. Diese Annahme ist gerechtfertigt, wie wir weiter unten sehen werden.

Nehmen wir nun einmal an, die zweite Lösung ϕ mit der größeren Energie sei im Intervall $[q^1, q^2]$ ebenfalls positiv. Dann wäre die rechte Seite in (6.5) positiv *und* die linke Seite negativ, was offensichtlich unmöglich ist. Ist ϕ in dem Intervall dagegen negativ, so findet man wieder einen Widerspruch. Deshalb muss ϕ positive und negative Werte annehmen und hat damit zwischen q^1 und q^2 eine Nullstelle, einen Knoten.

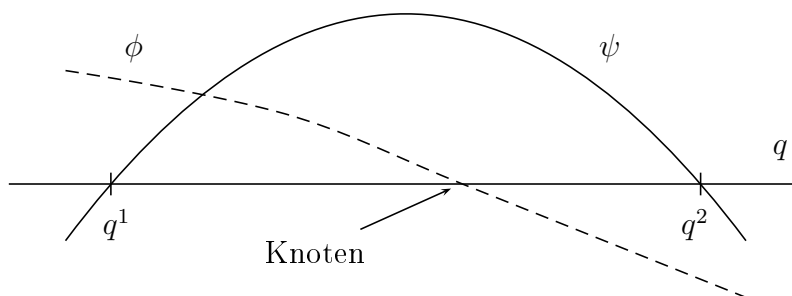


Abbildung 6.1: Verschwindet eine Lösung ψ der zeitunabhängigen Schrödingergleichung an den Orten q^1 und q^2 , dann muss jede andere Lösung ϕ mit größerer Energie zwischen diesen Orten das Vorzeichen wechseln, d.h. eine Knoten haben.

Nun wollen wir noch einsehen, dass der Grundzustand keinen Knoten und der n -te angeregte Zustand genau n Knoten hat. Es sei ψ_E nun eine Lösung der Differentialgleichung $H\psi_E = E\psi_E$. Wir leiten diese Gleichung partiell nach der Energie ab und erhalten

$$H\phi = \psi_E + E\phi \quad \text{mit} \quad \phi = \frac{\partial\psi_E}{\partial E}. \quad (6.6)$$

Nun finden wir für die Ortsableitung der Wronski-Determinante von ψ_E und ϕ

$$[A(\psi_E\phi' - \psi_E'\phi)]' = -\rho\psi_E^2. \quad (6.7)$$

Wir untersuchen das *Dirichlet-Problem*, bei dem die Funktionen insbesondere am linken

Intervallende bei L_1 verschwinden müssen. Dazu lösen wir das *Anfangswertproblem*

$$H\psi_E = E\psi_E \quad \text{mit} \quad \psi_E(L_1) = 0, \quad \psi'_E(L_1) = C \neq 0, \quad (6.8)$$

wobei es wegen der Linearität der Schrödingergleichung nicht auf den Wert der Konstanten C ankommt. Für ein generisches $E \in \mathbb{R}$ wird die Lösung ψ_E am rechten Intervallende bei L_2 allerdings nicht verschwinden. ψ_E erfüllt zwar das Anfangswertproblem (6.8), ist aber keine Lösung des vorliegenden *Randwertproblems*

$$H\psi_E = E\psi_E \quad \text{mit} \quad \psi_E(L_1) = \psi_E(L_2) = 0. \quad (6.9)$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist aber ein Randwertproblem und neben der Differentialgleichung müssen auch die Randbedingungen erfüllt sein. Nur für spezielle Werte für E wird eine Lösung des Anfangswertproblems auch eine Lösung des Randwertproblems sein. Diese Werte sind die messbaren Energien des Systems mit Hamilton-Operator H und Dirichlet-Randbedingungen.

Nun integrieren wir die Gleichung (6.7) von L_1 bis zu dem Ort $q^2(E) > L_1$, wo ψ_E erstmalig verschwindet. Da $\psi_E(L_1)$ für alle E verschwindet, ist $\phi(L_1) = 0$ und damit gilt für jede Lösung des Anfangswertproblems

$$(A\psi'_E\phi)(q^2(E)) = \int_{L_1}^{q^2(E)} \rho\psi_E^2 > 0. \quad (6.10)$$

Für eine im Integrationsgebiet positive Wellenfunktion ψ_E ist $\psi'_E(q^2)$ negativ und damit $\phi(q^2)$ negativ. Ist ψ_E dagegen negativ, dann muss $\phi(q^2)$ positiv sein. Da ϕ die Ableitung von ψ_E nach der Energie ist, und daher

$$\begin{aligned} \psi_{E+\delta E}(q^2(E)) &= \psi_E(q^2(E)) + \phi(q^2(E)) \delta E + O((\delta E)^2) \\ &= \phi(q^2(E)) \delta E + O((\delta E)^2) \end{aligned}$$

gilt, wandert also in beiden Fällen mit zunehmender Energie die Nullstelle $q^2(E)$ nach links, siehe Abbildung 6.2.

Nehmen wir nun einmal an, der Grundzustand verschwinde nicht nur an den Intervallenden $L_1 < L_2$, sondern habe außerdem einen Knoten im Intervall. Nun verringern wir die Energie in der Schrödingergleichung relativ zur vermeintlichen Grundzustandsenergie. Dann wandert der Knoten nach rechts. Bei stetiger Verringerung von E wird der Knoten irgendwann bei L_2 ankommen. Dann haben wir eine Lösung der Schrödingergleichung mit kleinerem E , die bei L_2 verschwindet, also eine Eigenfunktion mit kleinerer Energie. Da-

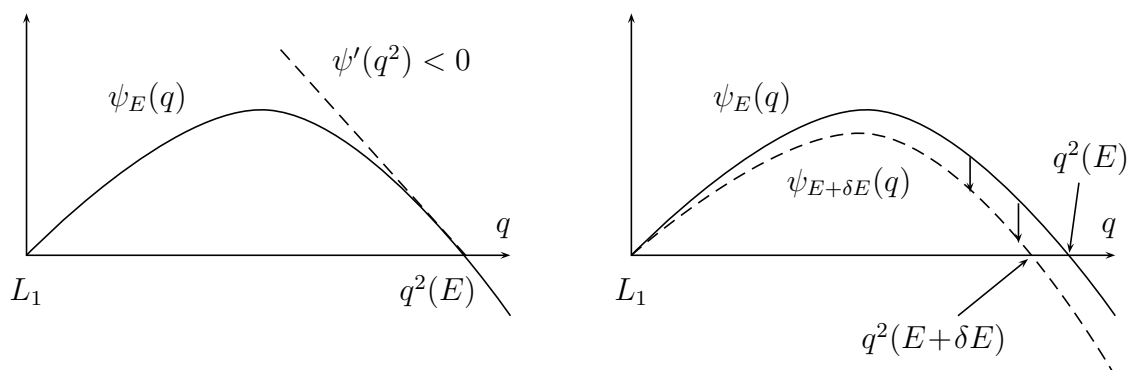


Abbildung 6.2: Mit zunehmender Energie wandert die Nullstelle $q^2(E)$ nach links.

mit war der Ausgangszustand offensichtlich nicht der Grundzustand. Der Grundzustand hat also keinen Knoten. Ähnlich zeigt man nun, dass der erste angeregte Zustand genau einen Knoten hat usw. Wegen (6.10) können für eine Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung ψ und ψ' nicht gleichzeitig verschwinden. Lösungen müssen die q -Achse immer schneiden, sie können sie nicht nur berühren.

6.3 Barrieren

In den verbleibenden Abschnitten dieses Kapitels wollen wir weitere wichtige Eigenschaften von Lösungen der eindimensionalen Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E'' + V\psi_E = E\psi_E \quad (6.11)$$

untersuchen. Der Raum der Wellenfunktionen sei der Raum $L_2(\mathbb{R})$ der quadratintegrierbaren komplexen Funktionen mit Skalarprodukt

$$(\phi, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \bar{\phi}(x)\psi(x)dx. \quad (6.12)$$

Deshalb bezeichnen wir die kartesische Koordinate im Folgenden mit x . Es sei nun $V(x)$ eine *Potentialstufe*

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0, \\ V > 0 & \text{falls } x > 0. \end{cases} \quad (6.13)$$

In der klassischen Mechanik gibt es zwei qualitativ verschiedene Situationen:

- Für $E > V$ kann sich ein Teilchen überall aufhalten. Wegen der Energieerhaltung ist seine Geschwindigkeit auf der rechten Seite der Stufe kleiner als auf der linken Seite.
- Für $E < V$ kann sich das Teilchen nur links der Stufe aufhalten. Die Stufe wird zur unüberwindbaren Barriere.

In der Quantenmechanik ist die letzte Aussage falsch. Um dies einzusehen, lösen wir die Schrödingergleichung (6.11) für das Stufenpotential (6.13). Sie ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und hat zwei linear unabhängige Lösungen. Für ein konstantes Potential V lautet die allgemeine Lösung

$$\psi_E = \alpha e^{iqx/\hbar} + \beta e^{-iqx/\hbar} \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2m(E - V)} \quad (6.14)$$

und zwei beliebigen Koeffizienten α und β . Für $E > V$ oder reelles q ist ψ_E die Überla-

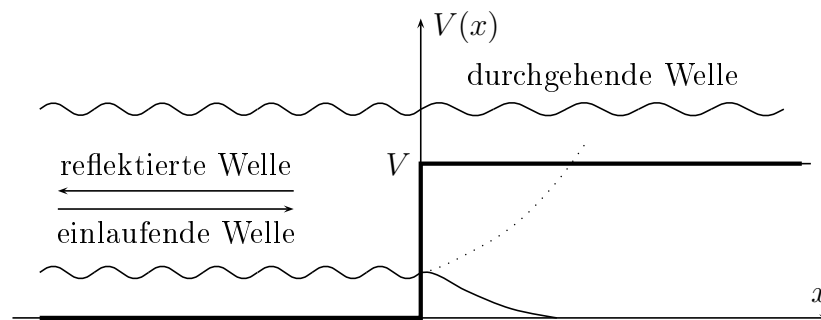


Abbildung 6.3: Reflexions und Transmission an der Potentialbarriere.

gerung von zwei ebenen Wellen und für $E < V$ oder imaginäres q von einer exponentiell fallenden und einer exponentiell wachsenden Funktion.

Teilchen mit Energien größer V :

Erinnert man sich an die Zeitabhängigkeit der zeitabhängigen Lösung,

$$e^{ipx/\hbar} \longrightarrow e^{-i(Et - px)/\hbar}, \quad (6.15)$$

so sieht man, dass die Lösungen $\sim e^{ipx/\hbar}$ zu nach rechts laufenden Teilchen gehören, und Lösungen $e^{-ipx/\hbar}$ zu nach links laufenden Teilchen. Deshalb beschreibt

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha e^{ipx/\hbar} + \beta e^{-ipx/\hbar}, & p = (2mE)^{1/2} & \text{für } x < 0, \\ \gamma e^{iqx/\hbar}, & q = (2m(E - V))^{1/2} & \text{für } x > 0, \end{cases} \quad (6.16)$$

eine nur von links einlaufende Welle. Der Term proportional α gehört zur einlaufenden ebenen Welle, der Term proportional β zur nach links *reflektierten* ebenen Welle und der Term proportional γ zur nach rechts *transmittierten* ebenen Welle. Diese Interpretation ergibt sich auch aus den Vorzeichen der entsprechenden Beiträge zur *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\bar{\psi}\psi' - \psi\bar{\psi}') = \begin{cases} \frac{p}{m}(|\alpha|^2 - |\beta|^2) & \text{falls } x < 0 \\ \frac{q}{m}|\gamma|^2 & \text{falls } x > 0. \end{cases} \quad (6.17)$$

Für ein endliches Potential V ist jede Lösung von (6.11) stetig differenzierbar. Andernfalls wäre ψ''_E an einigen Stellen unendlich, im Gegensatz zu $(E - V)\psi_E$, und könnte niemals Lösung der Schrödingergleichung (6.11) sein. Die Lösung (6.16) ist aber nur dann stetig differenzierbar an der Schwelle bei $x = 0$, wenn die Koeffizienten α, β und γ wie folgt verbunden sind,

$$\beta = \frac{p - q}{p + q}\alpha \quad \text{und} \quad \gamma = \frac{2p}{p + q}\alpha. \quad (6.18)$$

Benutzt man die Identitäten (6.18), so findet man

$$j(x < 0) = j(x > 0). \quad (6.19)$$

Der Nettofluss von links ist also gleich dem transmittierten Fluss. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist quellenfrei, im Einklang mit dem Schrödingerschen Erhaltungssatz für Eigenfunktionen von H . Die Reflexion ist ein aus der Wellenoptik bekanntes Phänomen. Für klassische Teilchen gibt es aber für $E > V$ keinen vergleichbaren Effekt.

Es ist instruktiv, die Reflexion und Transmission eines *Wellenpaketes* anzuschauen. Für negative x sei also

$$\psi(t, x) = \int_0^\infty \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p) \left(e^{ipx/\hbar} + \frac{p - q}{p + q} e^{-ipx/\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} = \psi_{\text{ein}}(t, x) + \psi_{\text{ref}}(t, x), \quad (6.20)$$

und für positive x

$$\psi(t, x) = \int_0^\infty \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p) \frac{2p}{p + q} e^{i(qx - Et)/\hbar} = \psi_{\text{trans}}(t, x). \quad (6.21)$$

Dies ist die allgemeinste Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für ein von links einlaufendes Wellenpaket. Die reelle Funktion f habe bei $p = p_0$ ein ausgeprägtes

Maximum. Für festes t oszilliert die Funktion im Exponenten des Integranden

$$f(p) e^{i(px-Et)/\hbar}$$

von ψ_{ein} in der Nähe von p_0 so schnell, dass destruktive Interferenz stattfindet. Falls aber x ein Punkt ist, wo die Phase einigermaßen konstant ist für p in der Nähe von p_0 , dann werden wir einen wesentlichen Beitrag zum Integral erhalten. Also lautet die Bedingung für konstruktive Interferenz

$$\frac{d}{dp}(px - Et)|_{p_0} = x - \frac{p_0}{m}t = 0 \quad \text{bzw.} \quad x = \frac{p_0}{m}t. \quad (6.22)$$

Für positive Zeiten kann diese Bedingung nicht mehr erfüllt werden, da x negativ und p_0 positiv ist, und die einlaufende Welle verschwindet rasch. Die reflektierte Welle

$$\psi_{\text{ref}}(t, x) = \int_0^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p) \frac{p-q}{p+q} e^{-i(px+Et)/\hbar} \quad (6.23)$$

ist dagegen bei $x = -p_0t/m$ konzentriert. Wegen $x < 0$ muss t positiv sein. Ähnlich ist die transmittierte Welle

$$\psi_{\text{trans}}(t, x) = \int_0^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p) \frac{2p}{p+q} e^{i(qx-Et)/\hbar} \quad (6.24)$$

bei $x = q_0t/m$ konzentriert, solange $x > 0$ und $t > 0$ sind. Für $t < 0$ sind die reflektierte und transmittierte Welle beliebig klein.

Wir gewinnen also folgendes Bild: zur Zeit $t = 0$ trifft das Wellenpaket mit konstanter Geschwindigkeit p_0/m von links auf die Potentialbarriere, wo es in ein reflektiertes und ein transmittiertes Paket aufspaltet. Das reflektierte Paket bewegt sich mit derselben Geschwindigkeit wie das einlaufende Paket nach links von der Barriere weg. Das transmittierte Paket bewegt sich mit der kleineren Geschwindigkeit q_0/m nach rechts von der Barriere weg. Wir betonen noch einmal: nicht das Teilchen zerbricht in zwei Teile, nur die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Aufenthaltsort des Teilchens spaltet sich auf.

Teilchen mit Energien kleiner V :

In diesem unklassischen Fall ist die Lösung die analytische Fortsetzung von (6.16) zu imaginärem $q = i\hbar k$, wobei für $\hbar k = \sqrt{2m(V-E)}$ die positive Wurzel gewählt werden muss, damit die Lösung auf der rechten Seite exponentiell abfällt und nicht exponenti-

ell anwächst. In diesem Fall ist $|\alpha|^2 = |\beta|^2$ und die einfallende Welle wird vollständig reflektiert; es gibt keine Transmission. Schreiben wir

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{p - i\hbar k}{p + i\hbar k} = -e^{2i\delta(E)}, \quad (6.25)$$

so finden wir

$$\hbar k = p \cot \delta. \quad (6.26)$$

Die zeitabhängige Lösung hat also die Form

$$\psi_E(t, x) = \begin{cases} \alpha(e^{-i(Et-px)/\hbar} - e^{-i(Et+px)/\hbar-2i\delta}) & \text{falls } x < 0 \\ 2\alpha p/(p + i\hbar k)e^{-iEt/\hbar-kx} & \text{falls } x > 0 \end{cases} \quad (6.27)$$

Verglichen mit der einfallenden Welle ist die reflektierte Welle bei $x = 0$ mit einem Faktor $-e^{2i\delta}$ *phasenverschoben*. Für $p \rightarrow 0$ ist $\beta = -\alpha$ und damit $\delta = 0$. Für $E > V$ hat die reflektierte Welle keine Phasenverschiebung bei $x = 0$, stattdessen findet man eine Änderung des Betrages.

Wir sehen, dass die Lösung (6.27) in die rechte Seite eindringt, obwohl $E < V$ ist. Bedeutet dies eine Verletzung der Energieerhaltung? Die Antwort ist nein. Das Teilchen dringt etwa bis zu einer Tiefe $1/k$ in die rechte Seite ein. Um es da zu messen, müssen wir eine Ortsmessung mit einer Genauigkeit von mindestens $\Delta x \leq 1/k$ vornehmen. Dann wird der Teilchenimpuls mit einer Unschärfe $\Delta p \geq \hbar k$ und die Energie mit einer Unschärfe $\Delta E \sim \hbar^2 k^2/2m = V - E$ behaftet sein. Nach der Messung ist die Energie, die E plus die zusätzliche kinetische Energie von der Lokalisierung des Teilchens ist, gerade mindestens so unsicher, dass wir nicht mehr sicher sind, ob die Energie des Teilchens kleiner als V ist.

6.4 Tunneleffekt

Die Tatsache, dass Teilchen in klassisch verbotene Gebiete eindringen können, führt zum wichtigen *Tunneleffekt*. Wir betrachten ein Potential der Höhe $V > 0$ zwischen $x = 0$ und $x = a$. Eine Eigenfunktion von H mit Energie $E < V$, die zu einer von links einfallenden Welle gehört, hat die Form

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha e^{ipx/\hbar} + \beta e^{-ipx/\hbar} & \text{für } x < 0 \\ \gamma e^{-kx} + \delta e^{kx} & \text{für } 0 < x < a \\ \alpha S(E) e^{ip(x-a)/\hbar} & \text{für } x > a, \end{cases} \quad (6.28)$$

wobei gilt

$$p = \sqrt{2mE} \quad \text{und} \quad \hbar k = \sqrt{2m(V - E)}. \quad (6.29)$$

Verlangen wir Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Wellenfunktion, so finden wir, dass

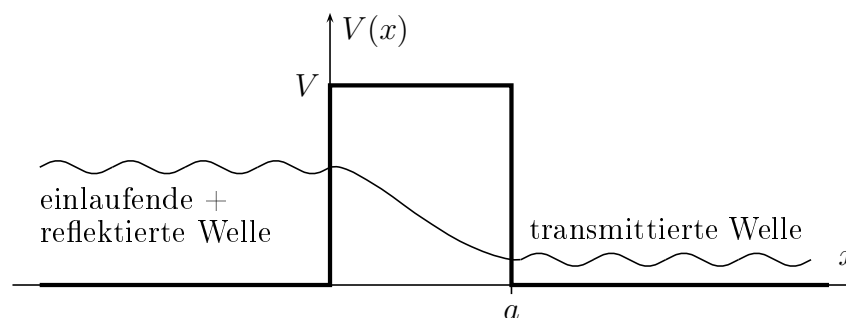


Abbildung 6.4: Ein Teilchen kann eine Barriere durchtunneln.

$\alpha S(E)$ ungleich Null ist. Dies muss so sein: Wäre $\alpha S(E) = 0$, so würde die Wellenfunktion rechts von der Barriere verschwinden, und wegen der Eindeutigkeit der Lösung wäre $\psi_E \equiv 0$. Dies bedeutet, dass obwohl klassische Teilchen mit $E < V$ die Barriere nicht überwinden können, es eine nichtverschwindende Amplitude dafür gibt, dass quantenmechanische Teilchen die Barriere durchtunneln. Die Funktion $S(E)$ heißt Tunnel-Matrixelement oder *Transmissionsamplitude*. Es ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein von links einlaufendes Teilchen mit Energie E die Barriere durchtunnelt. Die explizite Rechnung führt auf

$$S(E) = \frac{2i\hbar k p}{2i\hbar k p \cosh(ka) + (p^2 - \hbar^2 k^2) \sinh(ka)}. \quad (6.30)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein von links einlaufendes Teilchen die Barriere durchtunnelt, ist

$$T(E) = |S(E)|^2 = \left(1 + \frac{V^2}{4E(V - E)} \sinh^2(ka) \right)^{-1}. \quad (6.31)$$

Für große ka vereinfacht sich dieses Resultat zu

$$T(E) \sim \frac{16E(V - E)}{V^2} e^{-2a\sqrt{2m(V - E)}/\hbar}. \quad (6.32)$$

Die Wahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit der Barrierenbreite a und der Wurzel der effektiven Barrierenhöhe $V - E$ ab. Wegen $\log(16E(V - E)/V^2) \ll 2a\sqrt{2m(V - E)}/\hbar$ kann der Vorfaktor in einer Übersichtsrechnung erst einmal weggelassen werden.

Wir betrachten das Potentialmodell

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{falls } x < 0, \\ 0 & \text{falls } 0 < x < a, \\ V & \text{falls } a < x < a + d, \\ 0 & \text{falls } x > a + d, \end{cases}$$

siehe Abbildung 6.5. Zur Anfangszeit $t = 0$ sei nun ein Teilchen mit „Energie“ $E < V$

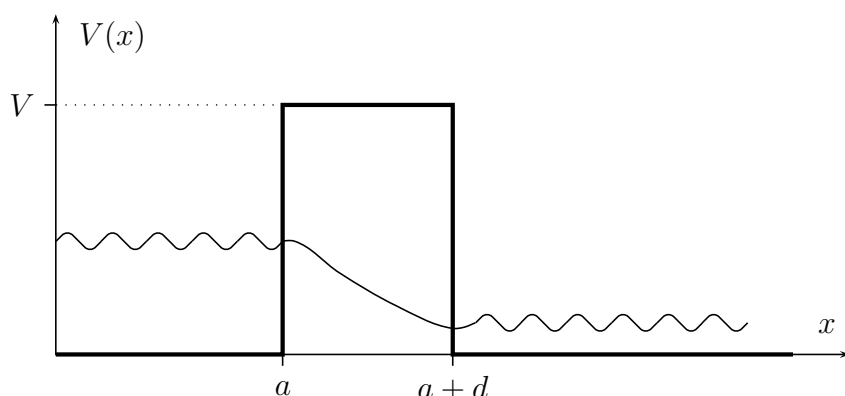


Abbildung 6.5: Ein Potentialmodell für den α -Zerfall.

im Topf $0 < x < a$. Dieses kann durch die Mauer zwischen a und $a + d$ der Höhe V durchtunneln und die Wellenfunktion im Topf wird langsam abnehmen. Das Verhältnis der Amplitudenquadrate bei $x = a$ und $x = a + d$ wird für große $a\sqrt{2m(V-E)}/\hbar$ etwa

$$T(E) \sim e^{-2d\sqrt{2m(V-E)}/\hbar} \quad (6.33)$$

sein. Klassisch würden wir sagen, dass jedesmal, wenn ein Teilchen gegen die Schwelle anrennt, es mit der Wahrscheinlichkeit T durchkommt und mit der Wahrscheinlichkeit $1 - T$ reflektiert wird. Wie oft rennt das Teilchen gegen den Wall an? Im halbklassischen Bild können wir dies leicht beantworten: Die kinetische Energie im tiefsten Topfzustand ist $E_{\text{kin}} = \hbar^2/8ma^2$, also ist die Geschwindigkeit $v = \hbar/2ma$. Der Graben der Breite a wird also pro Zeiteinheit $2ma^2/\hbar$ -mal durchquert. Das Reziproke davon gibt an, wie oft in der Sekunde das Teilchen anrennt

$$\nu_0 \sim \frac{\hbar}{2ma^2}. \quad (6.34)$$

Sitzen nun N Teilchen in Potentialtöpfen der diskutierten Art, entkommt davon innerhalb des nächsten Zeitintervalls dt eine Anzahl

$$dN = -\nu_0 T(E) N dt = -\frac{h}{2ma^2} e^{-2d\sqrt{2m(V-E)}/\hbar} N dt. \quad (6.35)$$

Ein atomarer Potentialtopf hat Abmessungen von einigen Ångström und typische Wallhöhen von einigen eV. Für Elektronen ($m = 0.9 \cdot 10^{-30}$ kg) wird für 1 Ångström und 1 eV der Exponent in (6.35) gleich -1 und der Faktor ν_0 etwa 10^{16} s^{-1} . Protonen und schwerere Teilchen haben sehr viel kleinere ν_0 und erst recht kleinere T . Für solche Teilchen sind nur wesentlich dünnere Wände durchlässig.

Die Möglichkeit zu tunneln ist inhärent in die Schrödingergleichung eingebaut. Haben wir eine nichtverschwindende Amplitude in einem Gebiet, so setzt sich die Amplitude wegen der Stetigkeits- und Differenzierbarkeitsbedingung in das andere Gebiet fort. Mittels des Tunneleffekts kann man im nuklearen Bereich den α -Zerfall oder das relativ einfache Eindringen von geladenen Teilchen in Kerne verstehen; auch beim Herausreißen von Elektronen aus Molekülen oder Metalloberflächen durch elektrische Felder, beim Ladungsfluss zwischen zwei durch einen Isolator getrennte Metalle u.v.a. spielt der Tunneleffekt eine wichtige Rolle (Feldemission, Tunneldioden, ...).

6.5 Resonanzen

Die gebundenen Eigenzustände im *Potentialtopf*

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < -a \\ -V & \text{falls } -a < x < a \\ 0 & \text{falls } x > a, \end{cases} \quad (6.36)$$

haben negative Energien zwischen 0 und $-V$ und sind entweder gerade oder ungerade Funktionen, wie wir später sehen werden. Die geraden Eigenfunktionen haben die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha \cos \frac{qx}{\hbar} & \text{im Wall} \\ \gamma e^{-kx} & \text{falls } x > a \\ \gamma e^{kx} & \text{falls } x < -a \end{cases} \quad (6.37)$$

und die ungeraden Eigenfunktionen

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha \sin \frac{qx}{\hbar} & \text{im Wall} \\ \gamma e^{-kx} & \text{falls } x > a \\ -\gamma e^{kx} & \text{falls } x < -a, \end{cases} \quad (6.38)$$

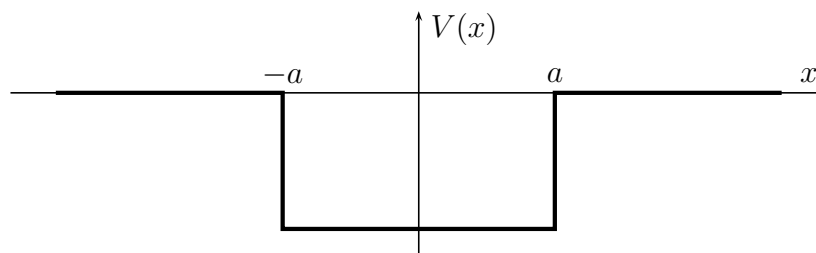


Abbildung 6.6: Gebundene Zustände und Resonanzen im Potentialtopf.

wobei

$$q = \sqrt{2m(E + V)} \quad \text{und} \quad \hbar k = \sqrt{-2mE}$$

gesetzt wurden. Stetigkeit und Differenzierbarkeit implizieren

$$q \tan \frac{qa}{\hbar} = \hbar k \quad \text{bzw.} \quad q \cot \frac{qa}{\hbar} = -\hbar k, \quad (6.39)$$

je nachdem, ob die Eigenfunktionen gerade oder ungerade sind. Für sehr kleine V gibt es nur einen gebundenen Zustand, den geraden Grundzustand. Erhöht man V , dann taucht ein zweiter gebundener Zustand auf, der ungerade ist. Erhöht man V weiter, so findet man eine zunehmende Zahl gebundener Zustände, abwechselnd gerade und ungerade.

Nach der endlichen Anzahl gebundener Zustände wollen wir uns nun mit den ungebundenen Zuständen mit positiven Energien beschäftigen. Die Zustände *positiver Energie* sollen wieder von links einlaufende Teilchen beschreiben, die teilweise reflektiert, teilweise transmittiert werden. Derartige Streulösungen haben die Form

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha e^{ipx/\hbar} + \beta e^{-ipx/\hbar} & \text{falls } x < -a \\ \gamma e^{iqx/\hbar} + \delta e^{-iqx/\hbar} & \text{falls } -a < x < a \\ \alpha S(E) e^{ip(x-a)/\hbar} & \text{falls } x > a \end{cases} \quad (6.40)$$

wobei $q = \sqrt{2m(E + V)}$ und $S(E)$ die *Transmissionsamplitude* ist. Stetigkeit und Differenzierbarkeit implizieren

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{\alpha} &= \frac{i}{2} \left(\frac{q}{p} - \frac{p}{q} \right) e^{-i2pa/\hbar} S(E) \sin \frac{2aq}{\hbar} \\ \frac{\gamma}{\alpha} &= \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} + 1 \right) e^{-ia(p+q)/\hbar} S(E) \\ \frac{\delta}{\alpha} &= \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} - 1 \right) e^{ia(q-p)/\hbar} S(E) \end{aligned} \quad (6.41)$$

mit Transmissionsamplitude

$$S(E) = \left(\cos \frac{2aq}{\hbar} - \frac{i}{2} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right) \sin \frac{2aq}{\hbar} \right)^{-1}. \quad (6.42)$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist dann

$$T(E) = |S(E)|^2 = \left(1 + \frac{V^2}{4E(V+E)} \sin^2(2aq/\hbar) \right)^{-1}. \quad (6.43)$$

Für

$$\sin(2aq/\hbar) = 0 \iff E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} - V > 0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.44)$$

wird das Potential vollständig transparent. Gleichzeitig verschwindet β und es gibt keine Reflexion, wie durch die Stromerhaltung verlangt wird. Die Maxima von T heißen *Resonanzen*, siehe Abb. 6.7. Die eben diskutierte Resonanzerscheinung tritt in der mikro-

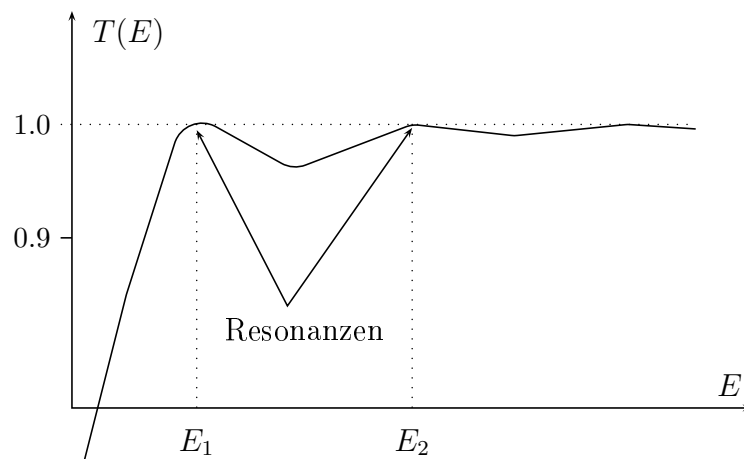


Abbildung 6.7: Resonanzen bei der Streuung am Potentialtopf.

skopischen Physik häufig auf. Streuresonanzen zeigen sich auch bei anderen Formen des Potentials, falls dieses in einem bestimmten Raumbereich stark anziehend wird.

6.5.1 Analytische Eigenschaften von $S(E)$

$S(E)$ in (6.42) hat *Pole*, wenn

$$\cos \frac{2aq}{\hbar} = \frac{i}{2} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right) \sin \frac{2aq}{\hbar} \quad (6.45)$$

gilt. Diese Gleichung hat nur Lösungen für imaginäre p . Ist der Imaginärteil von p positiv, so fallen die transmittierte und reflektierte „Welle“ exponentiell ab. Weiterhin muss wegen (6.41) der Koeffizient α verschwinden (sonst würden γ und δ beide unendlich sein). Also gibt es keine exponentiell anwachsende „einlaufende Welle“. Natürlich propagieren die exponentiell abfallenden transmittierten und reflektierten Anteile der Lösungen nicht und die Bedingung $S = \infty$ ist genau die Bedingung dafür, dass die Lösungen gebundene Zustände beschreiben. Davon wollen wir uns nun auch formelmäßig überzeugen. Wegen $\tan 2x = 2(\cot x - \tan x)^{-1}$ ist die Polbedingung äquivalent zu

$$\cot \frac{aq}{\hbar} - \tan \frac{aq}{\hbar} = \frac{ip}{q} - \frac{q}{ip} \quad (6.46)$$

und hat die Lösungen

$$q \cot \frac{aq}{\hbar} = ip \quad \text{bzw.} \quad q \tan \frac{aq}{\hbar} = -ip. \quad (6.47)$$

Vergleichen wir mit unserem früheren Resultat (6.39) für die gebundenen Zustände im Topf, so sehen wir, dass dies gerade die Bedingungen für die möglichen Energien der gebundenen Zustände sind (setze $p = i\hbar k$). Deshalb sind die *Polstellen* der Transmissions- oder Streuamplitude $S(E)$ die Energien der gebundenen Zustände.

6.6 Zerfallsbreiten

Wir untersuchen nun die Streuamplitude in der Nähe einer Resonanz mit Energie $E_0 > 0$. Nach (6.44) ist $\tan(2aq/\hbar) = 0$ und in erster Ordnung in $E - E_0$ gilt

$$\left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p}\right) \tan \frac{2aq}{\hbar} = \left(\left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p}\right) \frac{1}{\hbar} \frac{d(2aq)}{dE}\right) \Big|_{E_0} (E - E_0) \equiv \frac{4}{\Gamma} (E - E_0). \quad (6.48)$$

Damit hat $S(E)$ in der Nähe der Resonanzenergie die Form

$$S(E) \sim \frac{1}{\cos(2aq/\hbar)} \frac{1}{1 - \frac{2i}{\Gamma}(E - E_0)} \sim \frac{i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}. \quad (6.49)$$

Die Transmissionsamplitude hat einen Pol bei $E = E_0 - i\Gamma/2$. Der Realteil der Polstelle ist gleich der Resonanzenergie. Die Amplitude ist eine Funktion von \sqrt{E} . Mit $E = |E|e^{2\pi i\phi}$ ist $\sqrt{E} = \sqrt{|E|}e^{\pi i\phi}$ keine einfachwertige Funktion über der Energieebene. Wenn man \sqrt{E} um den Ursprung der komplexen Ebene fortsetzt und nach einem Umlauf zur selben Energie zurückkehrt, dann geht \sqrt{E} in $-\sqrt{E}$ über. \sqrt{E} ist also nicht einfachwertig, und wir wählen den Schnitt gerade unterhalb der positiven reellen Achse. Damit hat $S(E)$ längs

des Schnittes ein Unstetigkeitsstelle. Mathematisch gesehen ist $S(E)$ eine Funktion auf der zweiblättrigen Riemannschen Fläche über der Energieebene. Der Pol bei $E = E_0 - i\Gamma/2$ ist ein Pol der analytischen Fortsetzung von $S(E)$ von oberhalb nach unterhalb der positiven reellen Achse. Der Pol ist damit auf dem zweiten Riemannschen Blatt von $S(E)$. Wir fassen zusammen:

- Die Energien der gebundenen Zustände sind die Polstellen von $S(E)$ auf der negativen reellen Achse.
- Die Resonanzen sind da, wo $S(E)$ auf der reellen Achse Maxima hat.
- Alternativ gehören zu den Resonanzen Pole von $S(E)$ unterhalb der reellen Achse auf dem zweiten Riemannschen Blatt.

Diese Eigenschaften sind nicht spezifisch für den Potentialtopf. Es sind allgemeine Eigenschaften von Transmissionsproblemen in einer Dimension und Streuproblemen in drei Dimensionen.

Wir schreiben nun $S(E)$ mit Hilfe der *Phasenverschiebung* δ gemäß

$$S(E) = e^{i\delta(E)} |T(E)|^{1/2}. \quad (6.50)$$

Mit (6.42) findet man für die Phasenverschiebung bei Streuung am Potentialtopf

$$\tan \delta(E) = \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right) \tan \frac{2aq}{\hbar}. \quad (6.51)$$

Mit (6.48) ergibt sich dann

$$\delta(E) \sim \arctan \left(\frac{2}{\Gamma} (E - E_0) \right). \quad (6.52)$$

Wir sehen, dass sich die Phasenverschiebung in der Nähe einer Resonanz schnell ändert.

Physikalisch ist eine Resonanz beinahe ein gebundener Zustand. Schießen wir ein Teilchen mit Resonanzenergie von großer Entfernung auf das Potential, dann wird es im Topf oft hin- und herlaufen, ähnlich einem gebundenen Teilchen, bis es schließlich aufgrund seiner positiven Energie dem Potential entkommt. Man kann zeigen, dass \hbar/Γ die *Lebensdauer* des Zustands ist.

6.7 Numerische Lösung der stationären Gleichung

Zur numerischen Lösung der Schrödingergleichung (6.11) bringen wir diese zuerst in eine „dimensionslose“ Form. Dazu reskalieren wir die Ortskoordinate mit einer Länge x_0 und erhalten

$$\frac{d^2}{d(x/x_0)^2}\psi(x) + \frac{2mx_0^2}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0.$$

Messen wir x in Einheiten von x_0 und bezeichnen die Koordinate in diesem Einheitensystem wieder mit x , so folgt

$$\psi''(x) + F(x)\psi(x) = 0, \quad F(x) = \frac{2mx_0^2}{\hbar^2}(E - V(x_0x)). \quad (6.53)$$

Zum Beispiel, für den *anharmonischen Oszillator* mit Potential

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x^4 \quad (6.54)$$

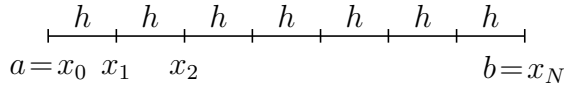
bietet sich die Längeneinheit $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ als Maßstab an. Damit ergibt sich die dimensionslose Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \psi'' + F\psi = 0, \quad F(x) &= \frac{E}{E_0} - x^2 - \frac{\lambda}{\lambda_0}x^4 \\ E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}, \quad \lambda_0 = \frac{m^2\omega^3}{2\hbar}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Die Hilfsfunktion $F(x)$ ist proportional zur kinetische Energie und positiv in den klassisch zugänglichen Gebieten mit $E > V(x)$.

6.7.1 Numerov-Algorithmus und Schieß-Verfahren

Die Schrödingergleichung (6.53) ließe sich ohne großen Aufwand mit der Runge-Kutta-Methode lösen. Ein jedoch besonders auf die Schrödingergleichung abgestimmtes numerisches Verfahren stellt der sogenannte Numerov- oder Fox-Goodwin-Algorithmus dar, der sich durch Genauigkeit und dennoch hohe Effizienz auszeichnet. Auf Grund dieser Vorteile wird im folgenden Programm der Numerov-Algorithmus zur Lösung der Schrödingergleichung auf einem endlichen Intervall verwendet.



Wir unterteilen das Intervall $[a, b]$ in N Strecken gleicher Länge $h = (b - a)/N$. Die n -te Stützstelle ist $x_n = a + nh$, also $x_0 = a, x_1 = a + h, \dots, x_N = b$.

Wie bei jeder numerischen Integrationsroutine ersetzen wir Differentiale durch Differenzen und die Funktion $\psi(x)$ durch ihre Werte an den Stützstellen. Für $h \rightarrow 0$ sollen die Differenzenquotienten gegen die entsprechenden Differentialquotienten konvergieren. Der gesuchte numerische Algorithmus zur Lösung der diskretisierten Schrödingergleichung soll eine zweigliedrige Iteration sein, die ausgehend von den Startwerten $\psi(x_0)$ und $\psi(x_1)$ alle weiteren Werte $\psi(x_n)$ der gesuchten Lösung $\psi(x)$ liefert. Nun wird die Wellenfunktion an den Orten $x \pm h$ in eine Taylorreihe nach h entwickelt,

$$\begin{aligned}\psi(x+h) &= \psi(x) + h\psi'(x) + \frac{h^2}{2}\psi''(x) + \frac{h^3}{6}\psi'''(x) + \frac{h^4}{24}\psi''''(x) + \dots, \\ \psi(x-h) &= \psi(x) - h\psi'(x) + \frac{h^2}{2}\psi''(x) - \frac{h^3}{6}\psi'''(x) + \frac{h^4}{24}\psi''''(x) + \dots\end{aligned}$$

Für die Summe ergibt sich

$$\psi(x+h) + \psi(x-h) = 2\psi(x) + h^2\psi''(x) + \frac{h^4}{12}\psi''''(x) + \dots, \quad (6.56)$$

was uns erlaubt, $\psi(x+h)$ bis zur Ordnung $O(h^6)$ aus den Daten bei x und $x-h$ zu berechnen. Da ψ die Schrödingergleichung erfüllen soll, dürfen wir $\psi''(x)$ durch $-F(x)\psi(x)$ ersetzen. Wir müssen noch einen geeigneten Ausdruck für $\psi''''(x)$ finden. Dazu benutzen wir nochmals (6.56), allerdings ohne den letzten Term der Ordnung $O(h^4)$ und angewandt auf $F\psi$ in

$$\begin{aligned}\psi''''(x) &\stackrel{(6.55)}{=} -(F(x)\psi(x))'' \\ &= -\frac{F(x+h)\psi(x+h) - 2F(x)\psi(x) + F(x-h)\psi(x-h)}{h^2} + O(h^2).\end{aligned} \quad (6.57)$$

Durch Einsetzen in (6.56) ergibt sich die zweigliedrige Rekursionsformel

$$\begin{aligned}\psi(x+h) &= \frac{1}{c(x+h)}(a(x)\psi(x) - c(x-h)\psi(x-h)) \\ c(x) &= 1 + \frac{h^2}{12}F(x), \quad a(x) = 2 - \frac{5h^2}{6}F(x).\end{aligned} \quad (6.58)$$

Wir haben mit dem Numerov-Algorithmus einen Algorithmus gefunden, der es ermöglicht, die Wellenfunktion $\psi(x)$ für eine beliebige Energie E und ein beliebiges Potential

$V(x)$ numerisch zu berechnen. Die erhaltene Wellenfunktion genügt den Randbedingungen jedoch meistens nicht. Zwei Arten von Randbedingungen können numerisch leicht implementiert werden:

1. Für ein im Intervall $[-L, L]$ eingesperrtes Teilchen muß die Wellenfunktion bei $\pm L$ verschwinden. Wir können bei der Integration mit dem Numerov-Verfahren die Bedingung $\psi(-L) = 0$, ergänzt durch $\psi(-L + h) = h$, stellen und den Wert der Funktion bei L berechnen. Wegen der Linearität der Schrödingergleichung ist dabei der Wert von $\psi(-L + h)$ nicht von Bedeutung, solange er nicht Null ist.
2. Für ein gerades Potential sind die Eigenfunktionen entweder gerade oder ungerade und es genügt, sie auf der positiven Halbachse zu berechnen. Wir integrieren dann von $x = 0$ bis zum rechten Intervallende. Für gerade Funktionen können wir mit $\psi(-h/2) = \psi(h/2) = 1$ starten und für ungerade Funktionen mit $\psi(h/2) = -\psi(-h/2) = h/2$.

Die Funktionsweise der *Shooting-* oder *Schiess-Methode* ist wie folgt: Wenn für ein gerades Potential die Startwerte bei $x = 0$ gewählt wurden, also $\psi(-h/2) = \psi(h/2) \neq 0$ für gerade Lösungen oder $\psi(h/2) = -\psi(-h/2) \neq 0$ für ungerade Lösungen, muss die Energie E so lange ausprobiert werden, d.h. es müssen so viele „Probeschüsse“ abgefeuert werden, bis $\psi(x)$ für L gegen Null strebt. Dabei kann L endlich oder unendlich sein. Bei einem Fehlschuss wächst oder fällt $\psi(x)$ für grosse x exponentiell. Betrachtet man $\psi(x)$ für große x (oder $x = L$ für endliches L) bei verschiedenen Energien E , so ändert $\psi(x)$ das Vorzeichen, wenn E einen Energie-Eigenwert E_n überstreicht. Bei einem Vorzeichenwechsel ändert die Knotenzahl um Eins und deshalb ist die Anzahl Vorzeichenwechsel gleich der Knotenzahl. Nach dem Knotensatz steigt also die Anzahl Vorzeichenwechsel mit der Energie. Demnach muss zunächst nach zwei Energie-Eigenwerten gesucht werden, deren Knotenzahl sich um genau 1 unterscheiden. Zwischen diesen beiden Energie-Werten befindet sich genau *ein* Energie-Eigenwert E_n , der durch das Bisektionsverfahren beliebig genau angenähert werden kann. Durch wiederholtes Anwenden dieser Methode lassen sich alle gewünschten Energie-Eigenwerte E_n berechnen.

Das folgende einfache **Matlab-Octave**-Programm¹ löst die Schrödingergleichung für den anharmonischen Oszillator. Das Potential $V = x^2 + \lambda x^4$ wurde als Funktion im File `pot.m` definiert,

```
function V=pot (lam , x );
V=x .* x ;
V=V++lam*V.*V;
endfunction
```

¹Ich benutzte den Matlab-Clone Octave

Als Input wird die Kopplungskonstante λ und der Vektor x der Stützpunkte erwartet, $\mathbf{x}=(x[1], x[2], x[3], \dots)=\frac{1}{2}[-h, h, 3h, 5h, \dots]$. Die Funktion wird im Skript `schroed.m` (siehe unten) aufgerufen. Dieses erfragt die Schrittweite, die dimensionslose Kopplungskonstante λ und einen Schätzwert für die Energie. Die entsprechende Lösung der Differentialgleichung wird geplottet. Als Anfangsdaten werden im Programm

$$\psi(-h/2) = \psi(h/2) = 1$$

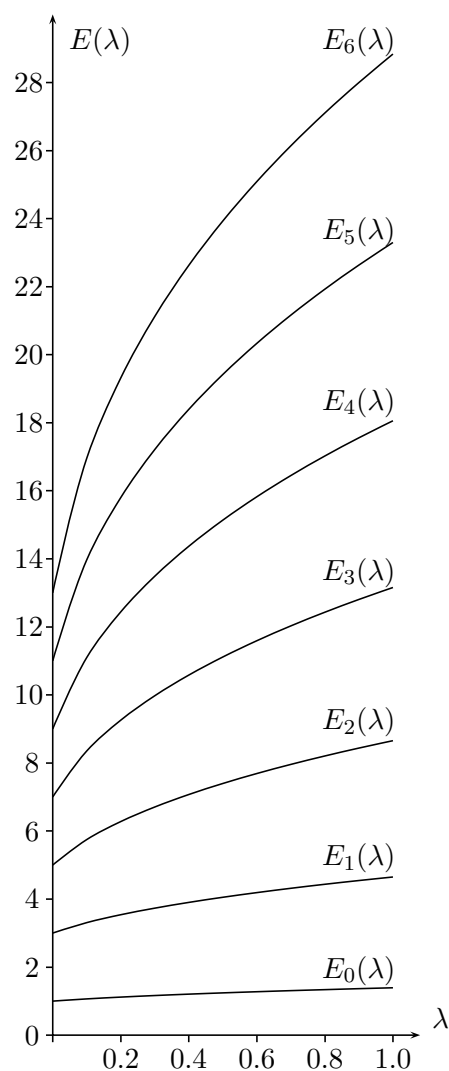
gewählt (der Wellenfunktion entspricht im Programm der Vektor `wfu`). Das Programm berechnet gerade Lösungen, also Lösungen mit $\psi(x) = \psi(-x)$. Um die ungeraden Lösungen zu gewinnen, sollte man das Programm abändern und zum Beispiel `-wfu(1)=wfu(2)=h/2` wählen. Das Programm enthält als wichtige Variablen die Schrittweite `h`, die Intervalllänge `ILaenge`, die Kopplung λ und die Energie `E`. Nach Abfrage der Parameter wird nach dem ersten Plot die gewünschte Änderung der Energie abgefragt. Will man die Energie erniedrigen, so gibt man ein negatives ΔE ein, will man sie erhöhen, ein positives.

```
% schroed.m: Schiessverfahren fuer anharmonischen Oszillator.
% Ruft Funktion pot.m auf. Es werden die Schrittweite,
% die Kopplung lambda und anfaengliche Energie abgefragt.
% Es wird mit dem Numerov-Verfahren von 0 bis 5 integriert.
h=input(" Schrittweite (typisch 0.001) ");
lam=input(" gebe lambda ein ");
ILaenge = 5.0; n=ceil( ILaenge/h+1);
wfu=ones(1,n); zero=zeros(1,n);
x=linspace(-h/2, ILaenge-h/2, n);
gset xrange [0:5]; gset yrange [-2:2];
h1=h*h/12; h2=5*h*h/6;
fh=pot(lam, x);
ch=1-h1*fh; bh=shift(ch, +1); ah=2+h2*fh;
E=input(" Energie eingeben ");
do
c=h1*E+shift(ch, -1); a=ah-h2*E; a=a./c; b=bh+h1*E; b=b./c;
for k=2:n-1
wfu(k+1)=a(k).*wfu(k)-b(k).*wfu(k-1);
endfor
d1=5*ones(1, length(wfu)); d2=min(wfu, d1); d3=max(d2, -d1);
plot (x', d3, zero');
dE=input(" Aenderung von E ");
E=E+dE; E
```

```
t=(dE==0);
until (t==1)
```

Die folgende Tabelle enthält die sieben tiefsten Eigenwerte des anharmonischen Oszillators für verschiedene Werte von λ . Die entsprechenden Kurven $E_n(\lambda)$ sind rechts geplottet. Für den harmonischen Oszillator mit $\lambda = 0$ ergeben sich für die Energie-Eigenwerte in Einheiten $\hbar\omega/2$ die Werte $E_n = 1 + 2n$. Wir werden sie im folgenden Kapitel mit rein algebraischen Methoden berechnen.

λ	0	0.1	0.2	0.3
E_0	1.000	1.065	1.118	1.164
E_1	3.000	3.307	3.539	3.732
E_2	5.000	5.748	6.277	6.705
E_3	7.000	8.352	9.257	9.975
E_4	9.000	11.098	12.440	13.488
E_5	11.000	13.969	15.799	17.212
E_6	13.000	16.954	19.315	21.123
λ	0.4	0.5	0.6	0.7
E_0	1.205	1.242	1.276	1.308
E_1	3.901	4.052	4.189	4.316
E_2	7.072	7.396	7.689	7.957
E_3	10.582	11.114	11.592	12.028
E_4	14.368	15.136	15.823	16.447
E_5	18.392	19.417	20.332	21.162
E_6	22.625	23.928	25.087	26.138
λ	0.8	0.9	1.0	10
E_0	1.337	1.366	1.392	2.449
E_1	4.434	4.544	4.648	8.598
E_2	8.205	8.437	8.654	16.634
E_3	12.430	12.805	13.156	25.804
E_4	17.022	17.556	18.056	35.882
E_5	21.925	22.633	23.296	46.725
E_6	27.103	27.997	28.834	58.237



6.7.2 Matrizenmechanik auf dem Computer

Wir wollen annehmen, das Intervall I sei endlich. Diese Annahme darf in guter Näherung auch für Systeme auf \mathbb{R} mit $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = \infty$ gemacht werden, da für $E < V(x)$ die Eigenzustände exponentiell abfallen. Es sollte deshalb zu vernachlässigbaren Fehlern führen, wenn wir künstliche Ränder bei genügend großem Abstand vom Ursprung einführen. Wählt man angepasste Einheiten, so bedeutet dies

$$I = [a, a + L] \quad \text{mit} \quad |I| = L \gg 1.$$

Wir diskretisieren dieses Intervall mit einer Schrittweite h , die fein genug sein muß, um Strukturen in den vorkommenden Wellenfunktionen auflösen zu können. Bei Wahl von natürlichen Einheiten heißt das $h \ll 1$. Erhöht man die Energie, so muß man unter Umständen L vergrößern, da die Eigenfunktionen weniger lokalisiert sind, und h verkleinern, da ψ kürzere Wellenlängen enthält.

Wir führen nun die äquidistanten Stützstellen²

$$x_k = a + kh, \quad k = 1, \dots, N, \quad h = \frac{L}{N} \quad (6.59)$$

ein, und ersetzen Wellenfunktionen durch Vektoren der Länge N mit komplexen Komponenten $\psi_k = \psi(x_k)$, $k = 1, \dots, N$. Der Einfachheit wegen wählen wir periodische Randbedingungen und identifizieren die Stützstellen x_k und x_{N+k} . Der Hilbertraum ist isomorph zu \mathbb{C}^N , versehen mit dem Skalarprodukt,

$$(\phi, \psi) = \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \psi_k, \quad \{\phi_k\}, \{\psi_k\} \in \mathbb{C}^N = \mathcal{H}. \quad (6.60)$$

Für eine auf Eins normierte Wellenfunktion interpretieren wir $|\psi_k|^2$ als Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen am Gitterpunkt x_k zu finden. Entsprechend ist der Erwartungswert des Ortsoperators

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \sum x_k |\psi_k|^2 \equiv \sum_{kk'} \bar{\psi}_k x_{kk'} \psi_{k'}. \quad (6.61)$$

Wie erwartet ist der Ortsoperator in der Ortsdarstellung diagonal,

$$x_{kk'} = x_k \delta_{kk'}, \quad (6.62)$$

und die Matrixelemente von \hat{x} verschwinden für $k \neq k'$. Um zu einer Darstellung des

²Wir folgen hier teilweise der Vorlesung *Computational Physics I* von U. Wolf.

Impulsoperators zu gelangen, wechseln wir mit Hilfe der diskreten Fourier-Transformation in den Impulsraum mit Wellenfunktionen $\tilde{\psi}(p_\ell) \equiv \tilde{\psi}_\ell$ wie folgt

$$\tilde{\psi}_\ell = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{-ip_\ell x_k} \psi_k, \quad p_\ell = \frac{2\pi}{L} \left(\ell - \frac{N+1}{2} \right), \quad \ell = 1, 2, \dots, N. \quad (6.63)$$

Die Verschiebung $(N+1)/2$ wurde so gewählt, dass die p_ℓ symmetrisch um den Ursprung liegen. Damit ψ_k periodisch ist muss N *ungerade* sein. Die Rücktransformation lautet

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell=1}^N e^{ip_\ell x_k} \tilde{\psi}_\ell, \quad x_k = a + kh, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (6.64)$$

Mit ψ ist auch $\tilde{\psi}$ auf Eins normiert und wir können $|\tilde{\psi}_\ell|^2$ als Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Impulses p_ℓ interpretieren. Dann ergibt sich für den Erwartungswert von $f(\hat{p})$

$$\begin{aligned} \langle f(\hat{p}) \rangle_\psi &= \sum_\ell f(p_\ell) |\tilde{\psi}_\ell|^2 = \frac{1}{N} \sum_\ell \sum_{kk'} e^{ip_\ell x_k - ip_\ell x_{k'}} f(p_\ell) \bar{\psi}_k \psi_{k'} = \sum_{kk'} \bar{\psi}_k f(p)_{kk'} \psi_{k'} \\ \text{mit } f(p)_{kk'} &= \frac{1}{N} \sum_\ell e^{ip_\ell (x_k - x_{k'})} f(p_\ell). \end{aligned} \quad (6.65)$$

Im Gegensatz zum Ortsoperator hat, wie erwartet, der Impulsoperators in der Ortsdarstellung nicht-diagonale Matrixelemente $p_{kk'}$. Mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$Z(x) = \sum_{\ell=1}^N e^{iLp_\ell x} = \frac{\sin \pi N x}{\sin \pi x}$$

können die Matrixelemente bestimmt werden,

$$f(p)_{kk'} = \frac{1}{N} f \left(\frac{1}{iL} \frac{d}{dx} \right) Z(x) \Big|_{x=(k-k')/N}$$

Insbesondere findet man folgende Matrixelemente für \hat{p}

$$\begin{aligned} p_{kk'} &= 0 && \text{für } k = k' \\ &= \frac{\pi}{iL} (-)^{k-k'} \frac{1}{\sin t_{kk'}} && \text{für } k \neq k' \end{aligned} \quad (6.66)$$

und folgende für \hat{p}^2 ,

$$\begin{aligned} p_{kk'}^2 &= \frac{\pi^2 N^2 - 1}{L^2} \frac{1}{3} && \text{für } k = k' \\ &= \frac{2\pi^2}{L^2} (-1)^{k-k'} \frac{\cos t_{kk'}}{\sin^2 t_{kk'}} && \text{für } k \neq k'. \end{aligned} \quad (6.67)$$

wobei wir $t_{kk'} = \pi(k - k')/N$ definiert haben. Nachdem wir die Matrixdarstellungen von \hat{x} und \hat{p}^2 gefunden haben, können wir Systeme vom Typ

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x})$$

untersuchen. Dabei ist $V(x)$ ein Potential, dass für große $|x|$ gegen unendlich streben soll. Wie weiter oben wählen wir Einheiten, für welche die zeitunabhängige Schrödingergleichung die dimensionslose Form

$$\hat{H}\psi \equiv \hat{p}^2\psi + V(\hat{x})\psi = E\psi \quad (6.68)$$

annimmt. Für den anharmonischen Oszillator mit $V = x^2 + \lambda x^4$ hat \hat{H} die Matrixelemente

$$H_{kk'} = p_{kk'}^2 + (x_k^2 + \lambda x_k^4) \delta_{kk'} \quad (6.69)$$

mit den Matrixelementen $p_{kk'}^2$ aus (6.66).

Das folgende Matlab-Octave-Programm `Hmatrix.m` setzt die Geometrie und berechnet die Eigenwerte von $(H_{kk'})$ für den anharmonischen Oszillator. Die Funktion wird mit

```
[H, x]=Hmatrix(a, N, lambda)
```

aufgerufen. Die Ausgangsmatrix H enthält die Hamilton-Matrix für den anharmonischen Oszillator mit Kopplungskonstante λ . Der Ausgangsvektor x enthält die Stützstellen für die gewählte Diskretisierung des Intervalls $[-L/2, L/2]$ mit N Stützstellen. Die Eigenwerte kann man mit der Matlab-Octave-Funktion `eig(H)` auslesen. Um die Genauigkeit der Resultate zu prüfen, sollte man für ein festes λ die Diskretisierung variieren.

```
function [H, x]=Hmatrix(L, N, lam);
# file Hmatrix.m
# Diskretisierung des Intervalls [-L/2, L/2] in N
# Intervalle und Berechnung der Energiematrizen
# fuer den anharmonischen Oszillator x^2 + lam x^4
# Aufruf ([H]=)Hmatrix(L, N, lam)
```



```

ks=linspace(1,N-1,N-1);
if (rem(N,2)==0)
    disp('N_must_be_odd!');
    break;
endif;
hilf1=pi/N; t=hilf1*ks; hilf2=pi/L;
#
t1=hilf2*(-1).^ks./sin(t);
t2=toeplitz([0,t1],[0,-t1]);
Hh=-t2*t2;
#
kl=[ks,N];
h=L/N;
x=-L/2+h*(kl-1/2);
[w]=pot(lam,x);
H=Hh+diag(w);
[(kl-1)', eig(H)]
endfunction

```

Für ein Intervall $[-10, 10]$ und $N = 101$ Stützstellen erhält man bereits die tiefsten 20 Energieeigenwerte des harmonischen und anharmonischen Oszillators mit $\lambda = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ und 1.0 mit einer relativen Genauigkeit von etwa 10^{-6} . In der folgenden Tabelle habe ich die tiefsten 20 Eigenwerte von H tabelliert.

λ	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
E_0	1.0000	1.1183	1.2048	1.2760	1.3375	1.3924
E_1	3.0000	3.5390	3.9011	4.1893	4.4339	4.6488
E_2	5.0000	6.2772	7.0726	7.6896	8.2057	8.6550
E_3	7.0000	9.2578	10.5825	11.5931	12.4312	13.1568
E_4	9.0000	12.4406	14.3689	15.8235	17.0228	18.0576
E_5	11.0000	15.7995	18.3927	20.3330	21.9263	23.2974
E_6	13.0000	19.3157	22.6265	25.0885	27.1041	28.8353
E_7	15.0000	22.9746	27.0498	30.0655	32.5285	34.6408
E_8	17.0000	26.7649	31.6466	35.2449	38.1778	40.6904
E_9	19.0000	30.6773	36.4040	40.6111	44.0349	46.9650

E_{10}	21.0000	34.7038	41.3110	46.1515	50.0853	53.4491
E_{11}	23.0000	38.8379	46.3587	51.8552	56.3170	60.1295
E_{12}	25.0000	43.0737	51.5392	57.7131	62.7196	66.9950
E_{13}	27.0000	47.4064	56.8456	63.7171	69.2843	74.0359
E_{14}	29.0000	51.8313	62.2721	69.8601	76.0031	81.2435
E_{15}	31.0000	56.3446	67.8132	76.1360	82.8690	88.6103
E_{16}	33.0000	60.9428	73.4643	82.5392	89.8759	96.1296
E_{17}	35.0000	65.6225	79.2210	89.0645	97.0181	103.7953
E_{18}	37.0000	70.3809	85.0794	95.7076	104.2907	111.6018
E_{19}	39.0000	75.2153	91.0360	102.4642	111.6888	119.5442

Die tiefsten 20 Eigenwerte von Oszillatoren

Das folgende `Matlab-Octave`-Skript `eigvekt.m` plottet die Eigenfunktion $\psi_n(x)$. Es verlangt als Eingabe die Nummer des Eigenwertes. Der Grundzustand hat die Nummer 1, der erste angeregte Zustand die Nummer 2 usw. Danach wird die Kopplungskonstante λ des anharmonischen Oszillators abgefragt.

```
# eigvekt.m: plottet die Eingenfunktionen
# des anharmonischen Oszillators. Die
# Funktion Hmatrix wird aufgerufen
#
closeplot;
L=input("Intervall-Laege L = ");
N=input("Anzahl Stuetzstellen N = ");
lam=input("Kopplungskonstante lam = ");
[H,x]=Hmatrix(L,N,lam);
[v,d]=eig(H);
# v enthaelt die Eigenvektoren
n=1;
grid;
while(n>0)
n=input("Eigenfunktion zu wievielten Eigenwert (Beenden = 0) ");
data=[x',v(:,n)]; gplot [-L/2:L/2] data;
endwhile
```

Das folgende `Matlab-Octave`-Skript `eigwerte.m` plottet die Energie-Eigenwerte E_n . Es verlangt als Eingabe die Intervall-Länge L , die Anzahl Stützstellen N , den Kopplungsparameter λ und die Anzahl zu plottender Energieniveaus. Gibt man $n = 5$ ein, so werden

die Energie des Grundzustands und der ersten 4 angeregten Zustände angezeigt.

```
# eigwerte.m: plottet die Eigenfunktionen
# des anharmonischen Oszillators. Die
# Funktion Hmatrix wird aufgerufen
L=input("Intervall-Laenge L = ");
N=input("Anzahl Stuetzstellen N = ");
lam=input("Kopplungskonstante lam = ");
[H,y]=Hmatrix(L,N,lam);
[v,d]=eig(H);
# v enthaelt die Eigenvektoren
# d auf der Diagonalen die Eigenwerte
n=1;x=[0;1];
do
clearplot;
gset xrange [0:2];gset grid;gset nokey;
n=input("Wieviel Energien anzeigen (Exit = 0) = ");
hold on;
for i=1:n
y=[d(i,i);d(i,i)+0.001];
data=[x,y];gplot data;
endfor
until (n==0)
```