Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 08 - Lösungen

Stilianos Louca

February 13, 2010

Aufgabe 15

Beginnend mit dem Potentialtopf des eindimensionalen harmonischen Oszillators

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} \cdot x^2 \tag{0.1}$$

suchen wir die Energieeigenwerte E der stationäre Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \partial_x^2 + V(x)\right] \psi = E \cdot \psi \tag{0.2}$$

Nennt man x_l, x_r die beiden Schnittpunkte von $E \geq 0$ und $V(x)$, sprich $V(x_{l/r}) = E$ bzw.

$$x_l = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad , \quad x_r = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

so erhält man in WKB-Näherung die (hinreichende & notwendige) Bedingung

$$\frac{1}{\hbar} \int\limits_{x_l}^{x_r} \sqrt{2m(E - V(x))}\, dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0 \tag{0.3}$$

Wegen

$$\int\limits_{x_l}^{x_r} \sqrt{2m(E - V(x))}\, dx = \sqrt{2mE} \int\limits_{x_l}^{x_r} \sqrt{1 - \left(\sqrt{\frac{m}{2E}} \cdot \omega x\right)^2}\, dx \overset{u := \sqrt{\frac{m}{2E}} \cdot \omega x}{=} \frac{2E}{\omega} \underbrace{\int\limits_{-1}^{1} \sqrt{1 - u^2}\, du}_{\frac{\pi}{2}} = \frac{\pi E}{\omega}$$

folgt aus (0.3)

$$\boxed{E = \omega\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0} \tag{0.4}$$

Beachte dass die Voraussetzungen

$$\left|\partial_x V\big|_{x_{l/r}}\right| < \infty \quad \& \quad V\big|_{(-\infty, x_l)} > E < V\big|_{(x_r, \infty)} \tag{0.5}$$

für die WKB-Näherung tatsächlich erfüllt sind. Nicht-desto-trotz, gilt (0.4) zunächst nur falls

$$\lambda(x) := \frac{h}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \ll (x_r - x_l)$$

um den Mittelpunkt der Potentialmunde, bzw. $n \gg 1$.[1]

[1] Bekanntlich sind (0.4) tatsächlich für $n \in \mathbb{N}_0$ die exakten Energieniveaus des harmonischen Oszillators.

Aufgabe 16

Linker Bereich

Die Eigenlösungen des Hamilton-Operators

$$H_l := \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_1$$

(linker Bereich) zur Energie E ergeben sich allgemein als

$$\psi_l(x) := L_1 \cdot \exp\left[-\frac{ip_l}{\hbar}\cdot x\right] + L_2 \cdot \exp\left[\frac{ip_l}{\hbar}\cdot x\right] \quad , \quad L_1, L_2 \in \mathbb{C} \tag{0.6}$$

wobei

$$p_l := \sqrt{2m(E-V_1)},\ L \in \mathbb{C} \tag{0.7}$$

Mittlerer & rechter Bereich

In WKB-Näherung ist die Wellenfunktion im rechten Bereich $x > b$ gegeben durch

$$\psi_r(x) := \frac{R_1}{\sqrt{p_r(x)}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int\limits_b^x p_r(x')\ dx'\right] + \frac{R_2}{\sqrt{p_r(x)}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int\limits_b^x p_r(x')\ dx'\right] \quad , \quad R_1, R_2 \in \mathbb{C} \tag{0.8}$$

wobei

$$p_r(x) := \sqrt{2m(E-V(x))}$$

Nach Übertragungsvorschrift (Ü2) (analytische Fortsetzung entlang oberen komplexen Halbkreis um $x = b$) entspricht dies im Bereich $a < x < b$ einer Wellenfunktion

$$\psi_m(x) := \frac{R_1}{\sqrt{|p_r(x)|}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b |p_r(x')|\ dx' - \frac{i\pi}{4}\right] + \frac{R_2}{\sqrt{|p_r(x)|}}\exp\left[\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b |p_r x')|\ dx' - \frac{i\pi}{4}\right] \tag{0.9}$$

Transmissionskoeffizient von links nach rechts

Interpretieren die Grundlösungen im rechten Bereich als jeweils nach links und nach rechts laufende Wellen, und setzen dementsprechend $R_1 = 0$ da wir keinerlei *Reflexionen* im rechten Bereich erwarten. Da jegliche Potentialunstetigkeiten endlich sind, erwarten wir den stetigen Übergang der Wellenfunktion und deren 1. Ableitung. Daher muss gelten:

$$\psi_l(a) = \psi_m(a) \ \Leftrightarrow\ L_1\exp\left[-\frac{ip_l}{\hbar}a\right] + L_2\exp\left[\frac{ip_l}{\hbar}a\right] = \frac{R_2}{\sqrt{|p_r(a)|}}\underbrace{\exp\left[\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^b |p_r(x')|\ dx' - \frac{i\pi}{4}\right]}_{=:W} \tag{0.10}$$

und

$$\partial_x\psi_l(a) = \partial_x\psi_m(a) \ \Leftrightarrow\ -i\frac{L_1 p_l}{\hbar}\exp\left[-\frac{ip_l}{\hbar}a\right] + i\frac{L_2 p_l}{\hbar}\exp\left[\frac{ip_l}{\hbar}a\right] = -R_2 W\cdot\underbrace{\left[\frac{m\cdot V'(a)}{2\,|p_r(a)|^{\frac{5}{2}}} + \frac{1}{\hbar}\,|p_r(a)|^{\frac{1}{2}}\right]}_{=:H} \tag{0.11}$$

Durch Multiplikation von (0.11) mit $-i\hbar/p_l$ und Addition mit (0.10) erhält man

$$L_2 = R_2\cdot\frac{W}{2}e^{-\frac{ip_l}{\hbar}\cdot a}\cdot\left[\frac{1}{\sqrt{|p_r(a)|}} + i\frac{H\hbar}{p_l}\right] \tag{0.12}$$

Interpretiert man den zweiten Term in (0.6) als nach rechts laufenden Anteil, so entspricht das einer *Einfallstromdichte*

$$j^{\text{einf}} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*_{\text{einf}}\frac{\partial\psi_{\text{einf}}}{\partial x} - \psi_{\text{einf}}\frac{\partial\psi^*_{\text{einf}}}{\partial x}\right) = |L_2|^2\cdot\frac{p_l}{m}$$

Ähnlich ergibt sich aus dem 2. Term in (0.8) die *Transmissionsstromdichte*

$$j^{\mathrm{trans}} = \frac{|R_2|^2}{m}$$

Vergleich der beiden Stromdichten liefert den Transmissionskoeffizienten

$$T := \frac{j^{\mathrm{trans}}}{j^{\mathrm{einf}}} = \frac{|R_2|^2}{|L_2|^2 p_l} \overset{(0.12)}{=} \frac{4}{|W|^2 p_l} \cdot \left| \frac{1}{\sqrt{|p_r(a)|}} + i\frac{H\hbar}{p_l} \right|^{-2}$$

Zusammen mit

$$|W|^2 = \exp\left[\frac{2}{\hbar} \int\limits_a^b \sqrt{2m\left(\tfrac{V_2 a}{x} - E\right)}\, dx \right]$$

$$= \exp\left\{ \frac{\sqrt{8m}}{\hbar} \left[\sqrt{V_2 a x - E x^2} + \frac{V_2 a}{2\sqrt{E}} \cdot \arccos\left(1 - \frac{2Ex}{V_2 a}\right) \right]_a^b \right\}$$

$$\overset{aV_2 = Eb}{=} \exp\left\{ \sqrt{\frac{2m}{E}} \frac{V_2 a}{\hbar} \underbrace{\left[\pi - \arccos\left(1 - \frac{2E}{V_2}\right) \right]}_{\arccos\left(\frac{2E}{V_2} - 1\right) = 2\arccos\sqrt{\frac{E}{V_2}}} - \frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_2 - E)} \right\}$$

und

$$\left| \frac{1}{\sqrt{|p_r(a)|}} + i\frac{H\hbar}{p_l} \right|^2 \overset{H \in \mathbb{R}}{=} \frac{1}{|p_r(a)|} + \frac{\hbar^2}{p_l^2}|H|^2 = \frac{\left[32ma^2(V_2 - V_1)(V_2 - E)^2 + \hbar^2 V_2^2 + 8a\hbar V_2 (V_2 - E)\sqrt{2m(V_2 - E)}\right]}{32ma^2(V_2 - E)^2(E - V_1)\sqrt{2m(V_2 - E)}}$$

schließlich

$$T = \exp\left[\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_2 - E)} - \frac{2a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}} \cdot V_2 \arccos\sqrt{\frac{E}{V_2}} \right]$$

$$\cdot \frac{128ma^2(V_2 - E)^2\sqrt{(E - V_1)(V_2 - E)}}{\left[32ma^2(V_2 - V_1)(V_2 - E)^2 + \hbar^2 V_2^2 + 8a\hbar V_2(V_2 - E)\sqrt{2m(V_2 - E)}\right]} \tag{0.13}$$

Vernachlässigt man nun im Nenner von (0.13) alle Terme mit Vorfaktoren $\hbar$ und $\hbar^2$, so erhält man

$$\boxed{T \approx 4 \cdot \exp\left[\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_2 - E)} - \frac{2a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}} \cdot V_2 \arccos\sqrt{\frac{E}{V_2}} \right] \cdot \frac{\sqrt{(E - V_1)(V_2 - E)}}{(V_2 - V_1)}} \tag{0.14}$$