

4 Anwendungen

4.5 Teilchen in einem endlichen, rechteckigen Potentialtopf

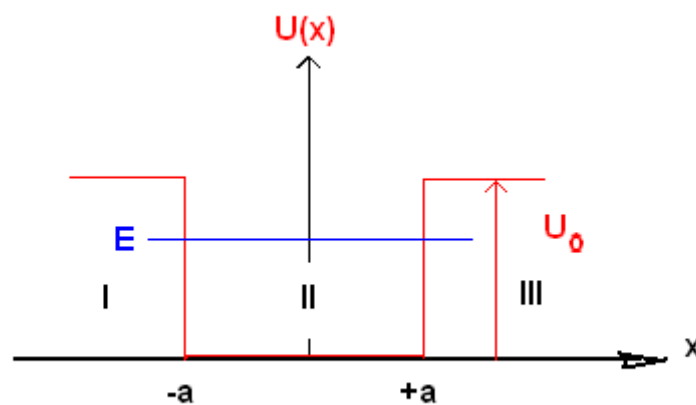


Fig. 1

Wir betrachten jetzt ein Teilchen, das sich in einem endlichen rechteckigen Potentialtopf der Höhe U_0 und der Breite $2a$ befindet, vgl. Fig.1.

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq -a \\ 0, & -a \leq x \leq a \\ U_0, & x \geq a \end{cases} \quad (1)$$

mit $U_0 > 0$ und $E < U_0$; E = Gesamtenergie des Teilchens

Das Rechteck-Potential kann z.B. als eindimensionales Modell des dreidimensionalen Potentials angesehen werden, das ein Neutron in einem Kern spürt. In der Chemie benutzt man den endlichen Topf, um das Potential zu modellieren, das ein Elektron in einem linearen Molekül wie $\text{H-C}\equiv\text{C-H}$ spürt, usw.

Wir nehmen an, dass die Energie E des Teilchens kleiner ist als U_0 , damit es dem Topf nicht entweichen kann und immer an den Bereich $-a \leq x \leq +a$ gebunden sein wird.

Aber, aufgrund der Quantenmechanik gibt es eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, dass man das Teilchen auch außerhalb dieser Schranken antreffen kann. Schon beim harmonischen Quantenoszillator haben wir gesehen, dass die Wellenfunktion außerhalb der klassischen Grenzen nicht verschwindet.

Für die Gebiete I und III kann man die Schrödingergleichung folgendermaßen aufstellen:

$$\psi''(x) - \beta^2 \psi(x) = 0; \quad \beta^2 := 2m(U_0 - E) / \hbar^2 \quad . (2)$$

In dem zentralen Bereich lautet sie

$$\psi''(x) + \alpha^2 \psi(x) = 0; \quad \alpha^2 := 2mE / \hbar^2 \quad . (3)$$

Durch einfaches Einsetzen können wir zeigen, dass die Lösungen wie folgt aussehen:

- a) $\psi_l = B_1 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x), \quad x \leq -a$
- b) $\psi_c = A_1 \exp(i\alpha x) + A_2 \exp(-i\alpha x), \quad -a \leq x \leq +a \quad (4)$
- c) $\psi_r = C_1 \exp(\beta x) + C_2 \exp(-\beta x), \quad x \geq +a$

A, B und C sind beliebige Konstanten.

Der Term $B_2 e^{-\beta x}$ strebt für $x \rightarrow -\infty$ auch nach Unendlich, denn β ist positiv. Das widerspricht aber dem 3. Postulat, und wir müssen deshalb $B_2 = 0$ setzen, wenn wir vermeiden wollen, dass ψ bei großen negativen x -Werten unendlich wird. Im Fall des Ausdrucks 4c müssen wir den ersten Term, $C_1 e^{\beta x}$, ausschließen, da er für große positive x -Werte unendlich wird, also setzen wir $C_1 = 0$. Damit lautet die Lösung von (2) und (3)

$$\psi = \begin{cases} \psi_l = B_1 e^{\beta x} \\ \psi_c = A_1 e^{i\alpha x} + A_2 e^{-i\alpha x} \\ \psi_r = C_2 e^{-\beta x} \end{cases} \quad (5)$$

Die zentrale Funktion ψ_c ist oszillatorisch (sinusförmig), denn $\exp(\pm i\alpha x) = \cos(\alpha x) \pm i \sin(\alpha x)$. Die Wellenfunktionen nehmen außerhalb des Topfes exponentiell mit der Entfernung ab.

Wenn wir für ψ_c eine reelle Lösung haben wollen, so wird stillschweigend angenommen, dass die gesuchte Lösung der Realteil (oder -je nach der Situation- auch der Imaginärteil) des komplexen ψ_c sein muss. (Wenn Ihnen die komplexe Rechnung nicht zusagt, können Sie die Lösung natürlich auch direkt in reeller Form schreiben: $\psi_c = A \cos(\alpha x) + B \sin(\alpha x)$). Vgl. auch 2.2 und 2.4.

Damit eine Wellenfunktion auch akzeptabel ist, muss sie das 3. Postulat erfüllen. Dieses verlangt, dass ψ und ψ' für alle x in $(-\infty, +\infty)$ stetig sind, auch in den Punkten $x = -a$ und $x = +a$ –es sind nur diese Punkte, die Probleme machen können.

ψ ist nur dann stetig in $x = -a$, wenn $\psi_1(-a) = \psi_c(-a)$. Ebenso ist ψ_1' nur dann in $x = -a$ stetig, wenn $\psi_1'(-a) = \psi_c'(-a)$. Analoge Bedingungen gelten für $x = +a$

Wenn wir diese Stetigkeitsforderungen auf (5) anwenden, folgt

$$B_1 \exp(-\beta a) = A_1 \exp(-i\alpha a) + A_2 \exp(i\alpha a) \quad (6)$$

$$B_1 \beta \exp(-\beta a) = A_1 i\alpha \exp(-i\alpha a) - A_2 i\alpha \exp(i\alpha a) \quad (7)$$

Elimination von B_1 ergibt

$$A_2 = -(\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) \cdot \exp(-2i\alpha a) \cdot A_1 \quad (8)$$

(Wir dividieren (7) durch $i\alpha$ und addieren dann zu (6). Es ergibt sich

$$B_1 \exp(-\beta a) = i\alpha / (i\alpha + \beta) \cdot 2A_1 \exp(-i\alpha a)$$

Einsetzung in (7) liefert $2\beta / (\beta + i\alpha) \cdot A_1 \exp(-i\alpha a) - A_1 \exp(-i\alpha a) = -A_2 \exp(i\alpha a)$, woraus dann (8) folgt).

Auf die gleiche Art erhalten wir

$$C_2 \exp(-\beta a) = A_1 \exp(i\alpha a) + A_2 \exp(-i\alpha a) \quad (9)$$

$$-C_2 \beta \exp(-\beta a) = A_1 i\alpha \exp(i\alpha a) - A_2 i\alpha \exp(-i\alpha a) \quad (10)$$

Elimination von C_2 liefert eine zweite Beziehung zwischen A_1 und A_2

$$A_2 = -(\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) \cdot A_1 \quad (11)$$

Die Gln. (8) und (11) müssen nicht konsistent sein. Die Bedingung dafür lautet

$$(\beta+i\alpha)/(\beta-i\alpha)\cdot\exp(2i\alpha a) = (\beta-i\alpha)/(\beta+i\alpha)\cdot\exp(-2i\alpha a) \quad (12)$$

Wir vereinfachen diese Beziehung zwischen α , β und a . Multiplikation mit den Nennern liefert

$$(\beta^2 + 2i\alpha\beta - \alpha^2) \exp(2i\alpha a) = (\beta^2 - 2i\alpha\beta - \alpha^2) \exp(-2i\alpha a)$$

$$\text{oder } (\beta^2 - \alpha^2) (\exp(2i\alpha a) - \exp(-2i\alpha a)) = -2i\alpha\beta (\exp(-2i\alpha a) + \exp(2i\alpha a)).$$

Mithilfe der *Eulerschen Formel* erhalten wir die Beziehungen

$$\exp(2\alpha ai) - \exp(-2\alpha ai) = 2i \sin(2\alpha a)$$

$$\exp(2\alpha ai) + \exp(-2\alpha ai) = 2 \cos(2\alpha a) ,$$

woraus folgt: $i(\beta^2 - \alpha^2)\cdot\sin(2\alpha a) = -2i\alpha\beta\cdot\cos(2\alpha a)$, oder

$$\text{tg}(2\alpha a) = -2\alpha\beta/(\beta^2 - \alpha^2) \quad (13)$$

Mit den Definitionen von α und β erhalten wir

$$\text{tg} [2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}] = 2[E(U_0-E)]^{1/2}/ (2E - U_0) \quad (14)$$

Für ein gegebenes Teilchen der Masse m und für einen gegebenen Potentialtopf der Tiefe U_0 und der Breite $2a$ ist (14) eine Gleichung mit nur einer Unbekannten, nämlich E . Also sind die Werte E , mit $0 < E < U_0$, für die die Schrödingergleichung sich "wohlverhaltende" (S.3-4) Lösungen hat, die Lösungen $E_1, E_2, E_3 \dots$ der transzendenten Gleichung (14) zwischen 0 und U_0 .

Wir können die Lösungen von Gl. (14) aber nur mithilfe graphischer oder numerischer Methoden finden, vgl. 4.5.1.

Ehe wir diese Eigenwerte, E_n , bestimmen, formulieren wir die entsprechenden Eigenfunktionen ψ_n .

Das Produkt der linken Seiten der obigen Gleichungen liefert A_2^2 und das der rechten Seiten A_1^2 , d.h. $A_2 = \pm A_1$. Aus Gl. (11) folgt dann

$$(\beta+i\alpha)/(\beta-i\alpha)\cdot\exp(2i\alpha a) = -/+ 1 \quad (15)$$

Für Gl. (5) benötigen wir die Koeffizienten B_1 und C_2 in Funktion von A_1 . Aus den Gleichungen (6), (11) und (15) erhalten wir

$$\begin{aligned} B_1 &= A_1(\exp(-i\alpha a) - (-/+)\exp(i\alpha a)) \cdot \exp(\alpha\beta) \\ &= A_1(\exp(-i\alpha a) \pm \exp(i\alpha a)) \cdot \exp(\alpha\beta) \end{aligned}$$

Die Eigenfunktion ψ_l lautet dann

$$\psi_{l,n} = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \quad (16)$$

worin $A := A_1$ durch Normierung von $\psi_{l,n}$ bestimmt werden muss.

Auf ähnliche Weise erhalten wir die Eigenfunktionen $\psi_{c,n}$ und $\psi_{r,n}$, sodass die Lösung der Schrödingergleichung wie folgt aussieht:

$$\psi_n = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \text{ für } x \leq -a$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n x) \pm \exp(-i\alpha_n x)), \text{ für } -a \leq x \leq a \quad (17)$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n a) \pm \exp(-i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha-x)), \text{ für } a \leq x$$

Um herauszufinden, welches der Vorzeichen zu nehmen ist, setzt man E_n in (15) ein und bestimmt so, welches der Vorzeichen brauchbar ist, vgl. die Beispiele.

(Man kann zeigen, dass es außer den diskreten Werten von E in $(0, U_0)$ auch ein kontinuierliches Spektrum von Eigenwerten für $E > U_0$ gibt.)

4.5.1 Die Eigenwerte

Als Nächstes haben wir jetzt die transzendente Gl. (14) zwischen 0 und U_0 zu lösen. Zuerst bestimmen wir graphisch Näherungslösungen von Gl. (14), alsdann berechnen wir numerisch Lösungen E_n mit fast beliebiger Genauigkeit.

Mit $e := 2a\alpha = 2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ erhalten wir für den Spezialfall $U_0 a^2 2m/\hbar^2 = 36$ die folgende Beziehung

$$\operatorname{tg} e = e(144 - e^2)^{1/2} / (e^2 - 72) \quad (18)$$

Wir suchen die Schnittpunkte der Funktionen $f(e) = e(144 - e^2)^{1/2} / (e^2 - 72)$ und $g(e) = \operatorname{tg}(e)$.

Die e -Werte können in $0 < e < 12$ liegen.

- `reset():// graphische Lösungen von Gl. (14)`
`f:=e*sqrt(144-e^2)/(e^2-72):`
`g:=tan(e):`
`plotfunc2d(f,g, e=0..12, YRange =-10..10,`
`AxisTitles=["e", "f(e),g(e)"])`

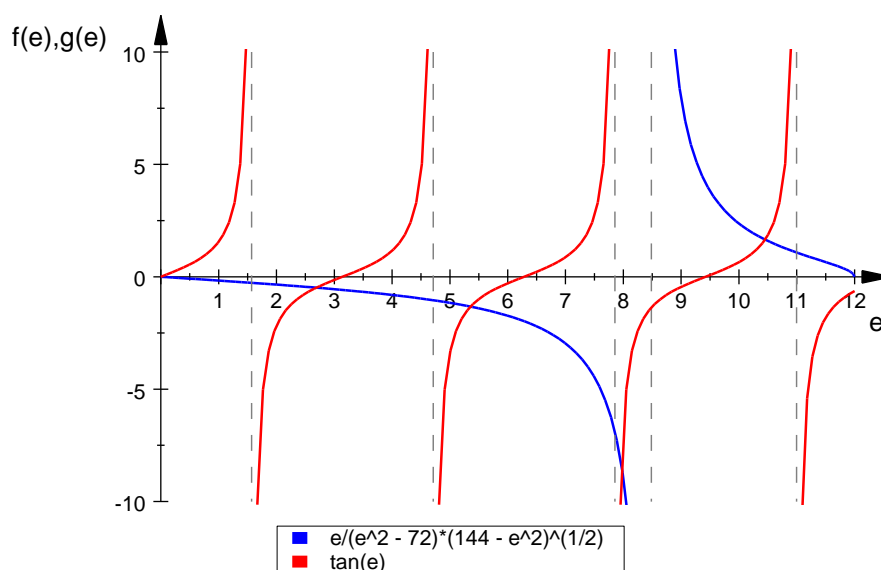


Fig. 2

Fig. 2 zeigt vier mögliche Schnittpunkte der Graphen von f und g mit den folgenden ungefähren Werten $e_1 \approx 2,7$, $e_2 \approx 5,4$, $e_3 \approx 7,9$, $e_4 \approx 10,5$. Um genauere Werte zu finden, kann man eine der iterativen Methoden benutzen, z.B. die aus 3.9.3 der *Mechanik*. Im folgenden Programm verwenden wir die MuPAD-Funktion `numeric::solve`. Für den zwischen 5 und 6 liegenden Schnittpunkt ergibt sich $e_2 \approx 5.357566217$.

- `reset() :`
`numeric::solve(tan(x)-x*sqrt(144-x^2)/(x^2-72), x=5..6)`
`{5.357566217}`

Die vier gerundeten Werte sind $e_1 = 2,6895$, $e_2 = 5,3576$, $e_3 = 7,9717$, $e_4 = 10,5419$. Aus $e := 2a (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ erhalten wir

$$E = e^2 \hbar^2 / (4a^2 \cdot 2m) = e^2 U_0 / (4 U_0) \cdot \hbar^2 / (2ma^2) = e^2 U_0 / 4 \cdot 1/36, \text{ d.h.}$$

$$E = e^2 U_0 / 144 := w \cdot U_0 \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
 E_1 &= (2,6895)^2/144 \cdot U_0 = 0,05023 \cdot U_0 \\
 E_2 &= 0,1993 \cdot U_0 \\
 E_3 &= 0,4413 \cdot U_0 \\
 E_4 &= 0,7586 \cdot U_0
 \end{aligned}$$

Um Gl. (15) anwendenzukönnen, benötigen wir die Werte von α_n und β_n (unter Verwendung von $U_0 a^2 2m / \hbar^2 = 36$). Wir erhalten

$$\alpha_n = 6/a \cdot (E_n/U_0)^{1/2} \quad \text{und} \quad \beta_n = 6/a \cdot ((U_0 - E_n)/U_0)^{1/2} \quad (20)$$

Mit diesen Ausdrücken erhalten wir aus (15) die Werte -1,+1,-1,+1. Ein Minuszeichen bedeutet, dass wir in (17) das obere Vorzeichen wählen müssen, d.h. das Pluszeichen, usw.

Beispiel:

$E_1 = 0.05023 \cdot U_0$. Mit diesem Wert ergibt sich

$$\alpha_1 = 6/a \cdot (E_1/U_0)^{1/2} = 1,3447/a$$

$$\beta_1 = 6/a \cdot ((U_0 - 0.05023U_0)/U_0)^{1/2} = 5,8474/a$$

Diese Werte müssen wir in Gl. (15) einsetzen:

$$a^{-1}(5,8474 + 1,3447 i) / a^{-1}(5,8474 + 1,3447 i) \cdot \exp(2,6894 i).$$

Wir vereinfachen dies mithilfe von $(a+ib)/(a-ib) = (a^2+b^2)/(a^2-b^2-2abi)$ und $e^{\pm ai} = \cos a \pm i \sin a$. Ergebnis:

$$-(32,382 - 15,73 i)/(32,384 - 15,73 i) \approx -1$$

In Gl. (17) haben wir also das positive Vorzeichen zu wählen.

Im Fall $E_2 = 0.1993 U_0$ ergibt sich $(21,636 - 28,772 i) / (21,65 - 28,762 i) \approx 1$, was bedeutet, dass das negative Vorzeichen benutzt werden muss, usw.

4.5.2 Die Eigenfunktionen

Für die Funktion ψ_1 ergeben sich damit die folgenden Ausdrücke

$$\begin{aligned}
 \psi_{1,1} &= A(\exp(-i\alpha_1 a) + \exp(i\alpha_1 a)) \cdot \exp(\beta_1(a+x)) \\
 &= A[\cos(\alpha_1 a) - i \sin(\alpha_1 a) + \cos(\alpha_1 a) + i \sin(\alpha_1 a)] \cdot \exp(\beta_1(a+x))
 \end{aligned}$$

$$= 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a+x))$$

$$= 2A \cos(1,3447) \exp(5,8474(1+z)), \quad z := x/a; \quad x \leq -a$$

$$\psi_{c,1} = 2A \cos(1,3447 z); \quad -a \leq x \leq +a$$

$$\psi_{r,1} = 2A \cos(1,3447) \exp(5,8474(1-z)); \quad x \geq a \quad (21)$$

Weiter unten, S. 4-17, werden wir zeigen, dass

$$A = (a + 1/\beta)^{-1/2}/2 \quad (22)$$

Für $\beta_1 = 5,8474/a$ ergibt sich $A_1 = 1/2(a + 0,1711a)^{1/2} = 0,924/2\sqrt{a} = 0,462/\sqrt{a}$

Mit $\beta_2 = 5,3689/a$ folgt $A_2 = 0,459/\sqrt{a}$; $A_3 = 0,452/\sqrt{a}$ und $A_4 = 0,432/\sqrt{a}$

Die folgenden vier Bilder beziehen sich auf die Fälle $n = 1$, $n = 2$, $n=3$ und $n = 4$. Die Wellenfunktionen zusammen mit den Werten der Parameter sind in den Programmen aufgeführt. In den Fällen $n=2$ und $n=4$ erscheinen die Faktoren "i", die wir für die Graphen vernachlässigen. (In Wirklichkeit zeichnen wir $\psi_2(z)/i$ und $\psi_4(z)/i$.)

```

• reset();// Psi beim endlichen Rechtecktopf, n = 1
  s1:=0.924*cos(1.3447)*exp(5.8474*(1+z)):
  s2:=0.924*cos(1.3447*z):
  s3:=0.924*cos(1.3447)*exp(5.8474*(1-z)):
  S1:=plot::Function2d(s1,z=-1.8..-1):
  S2:=plot::Function2d(s2,z=-1..1):
  S3:=plot::Function2d(s3,z=1..1.8):
  plot(S1,S2,S3, AxesTitles=["z","Psi(z)"],
  plot::Text2d("n = 1", [1.2, .6])):

```

Die Wellenfunktion ψ_1 ist symmetrisch und hat die Form

$$\psi_1 = \begin{cases} 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a+x)) & x < -a \\ 2A \cos(\alpha_1 x) & -a < x < a \\ 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a-x)) & x > a \end{cases}$$

ψ_3 hat eine ähnliche Gestalt: $2A \cos(\alpha_3 a) \exp(\beta_3(a+x)) \quad x < -a$, usw.

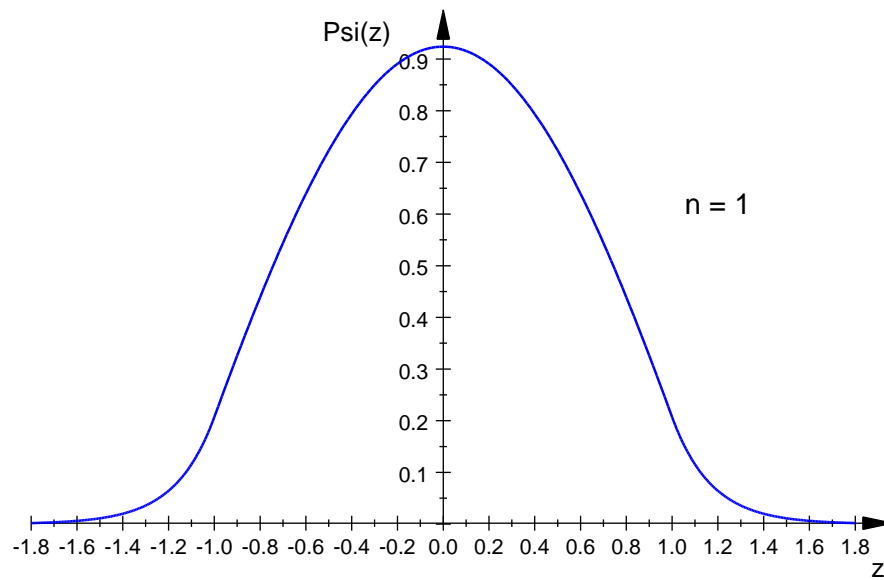


Fig. 3

Die Funktionen ψ_2 und ψ_4 haben die Form

$$\psi_n = \begin{cases} -i 2A \sin(\alpha_n a) \exp(\beta_n(a+x)) & x < -a \\ +i 2A \sin(\alpha_n x) & -a < x < a \\ +i 2A \sin(\alpha_n a) \exp(\beta_n(a-x)) & x > a \end{cases}$$

- `reset():// n = 2`
`s1:=-0.918*sin(2.6786)*exp(5.3689*(1+z)):`
`s2:=0.918*sin(2.678*z):`
`s3:=0.918*sin(2.6786)*exp(5.3689*(1-z)):`

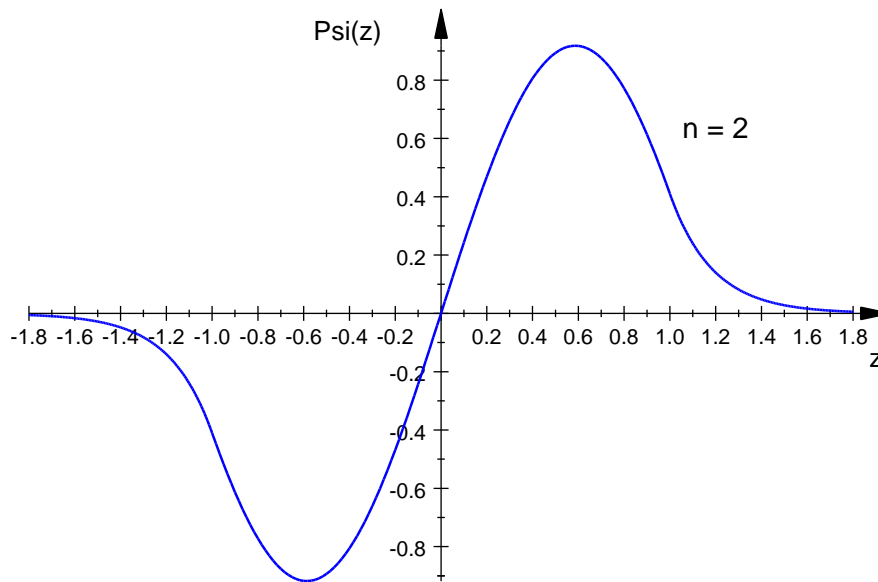


Fig. 4

- `reset():// n = 3`
`s1:=0.904*cos(3.986)*exp(4.485*(1+z)) :`
`s2:=0.904*cos(3.986*z) :`
`s3:=0.904*cos(3.986)*exp(4.485*(1-z)) :`

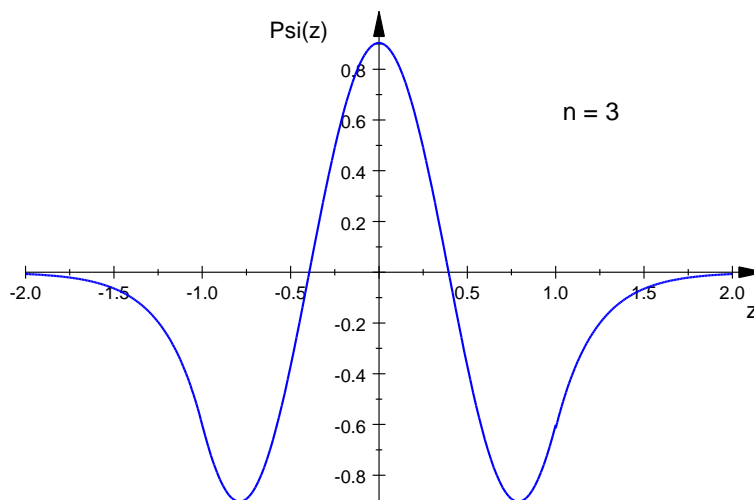


Fig. 5

- `reset():// n = 4`
`s1:=-0.864*sin(5.226)*exp(2.948*(1+z)):`
`s2:=+0.864*sin(5.226*z):`
`s3:=0.864*sin(5.226)*exp(2.948*(1-z)):`

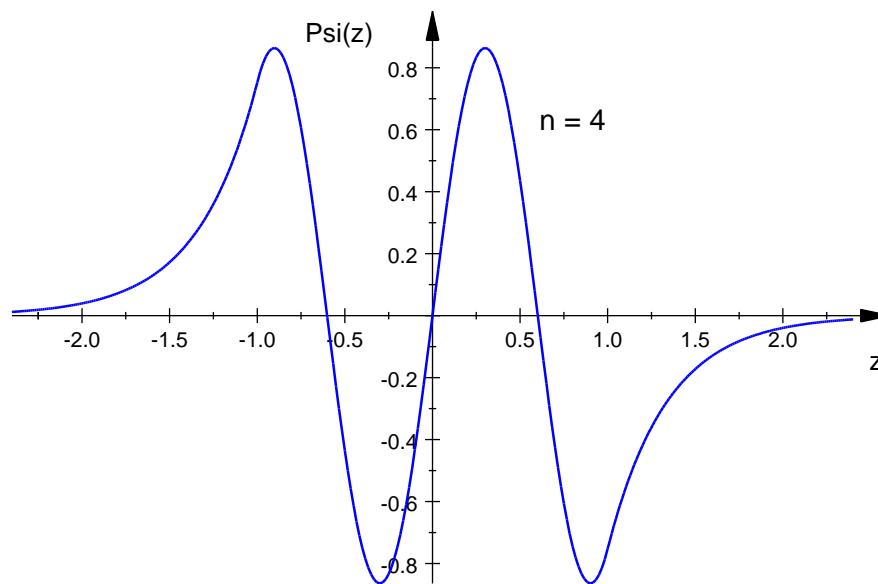


Fig. 6

Es ist eine allgemeine Eigenschaft der Lösungen der Schrödingergleichung eines gebundenen Zustands, dass die Anzahl der Nullstellen ("Knoten") von ψ gleich ist $n + 1$, wobei n die Quantenzahl ist. (Es gibt zwei Nullstellen in $x = \pm \infty$ und $n - 1$ in $-a < x < a$). Für ψ_4 erwarten wir also $n - 1 = 4 - 1 = 3$ Knoten im Intervall $-1 < x/a < 1$.

4.5.3 Die numerischen Lösungen

Ähnlich wie in Teil 4.2, im Fall des einfachen harmonischen Oszilators, werden wir jetzt das Problem des endlichen Potentialtopfes numerisch untersuchen. Zuerst entwickeln wir ein *Runge-Kutta*-Programm (es wurde in *Mechanik*, 3, beschrieben), anschließend verwenden wir ein sehr einfaches *Euler*-Programm, das in *Mechanik*, 3.1, ausführlich dargestellt wurde. (Programm für MuPAD 4)

- ```

• reset()://Endlicher Topf mit RK y''(t,y,y');a:=y'',v:=y'
 t:=0:y:=0:v:=2.459:s:=0:// de -a até +a; n = 2
 Y(0):=y:T(0):=t://Anfangswerte für die Trapezregel
 e:=36:w:=0.1993:g:=1://g = Topfgrenze
 h:=0.02:N:=91:// N = Anzahl der Rechenschritte
 DIGITS:=5:
 f:=(t,y,v)->-F*y:
 for i from 1 to N do
 if t>= 0 and t <= g-h then F:= e*w// Gleichung (3)
 else
 if t > g-h then F:= e*(w-1)//Gleichung (2)
 end_if
 end_if:
 v1:=v:
 a1:=f(t,y,v):
 v2:=v+a1*h/2:
 a2:=f(t+h/2,y+v1*h/2,v2):
 v3:=v+a2*h/2:
 a3:=f(t+h/2,y+v2*h/2,v3):
 v4:=v+h*a3:
 a4:=f(t+h,y+v3*h,v4):
 y:=y+h*(v1+2*v2+2*v3+v4)/6:
 v:=v+h*(a1+2*a2+2*a3+a4)/6:
 Y(i):=y:T(i):=t:
 t:=t+h:
 if (i=0) or (modp(i,10)=0) then
 print(t,y,v):
 end_if:
 end_for:
 s:=Y(0):
 for i from 1 to N step 1 do // Trapezregel
 s:=s+Y(i)^2:
 end_for:

```

```

s:=s-(Y(0)^2+y(N)^2)/2:
print(s*h)// Normierungsfaktor
plot(plot::Point2d(T(i),Y(i),Color=RGB::Blue,
AxesTitles=["z","Psi(z)"])
$ i=1..N step 2):

```

```

0.2, 0.46861, 2.1145
0.4, 0.80592, 1.1775
0.6, 0.91742, -0.089371
0.8, 0.77186, -1.3312
1.0, 0.41003, -2.2001
1.2, 0.14043, -0.7501
1.4, 0.048915, -0.25134
1.6, 0.01943, -0.07131
1.8, 0.014584, 0.018287

```

Normierungsfaktor: 0.49999

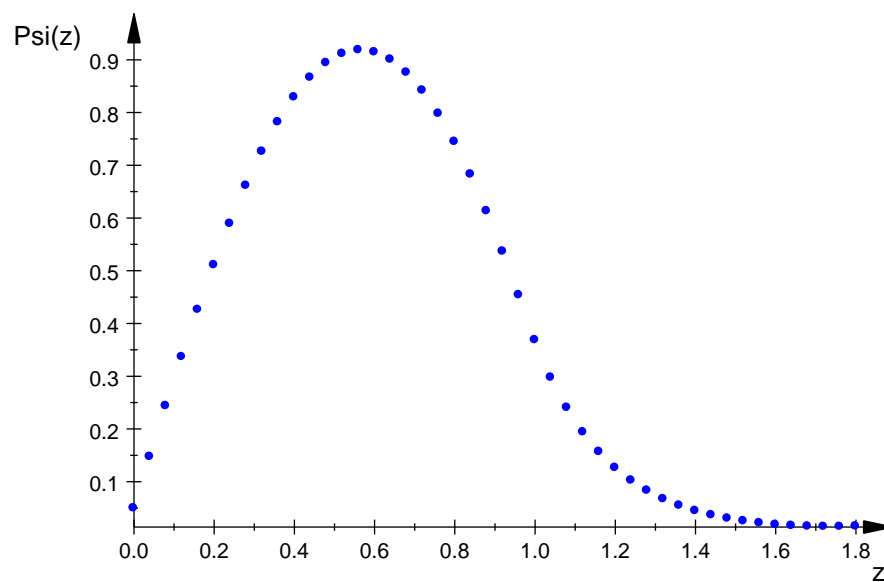


Fig. 7

Im Fall  $n = 4$ , mit  $y'(0) = 0.864 \cdot 5.226 = 4.515$ , erhalten wir

```
0.1, 0.43123, 3.9124
0.2, 0.74734, 2.2653
0.3, 0.86395, 0.013587
0.4, 0.74993, -2.2418
0.5, 0.43572, -3.8987
```

Normierungsfaktor: 0.49906

Der Normierungsfaktor sollte den Wert 0.5 ergeben (der linke Teil der Kurve, der ebenfalls 0.5 liefert, wurde nicht berechnet). Die Anfangssteigung  $y'(0)$  wurde durch Ableitung von  $\psi_c$  berechnet.

Für  $n = 2$  ergibt sich  $y'(0) = i 2A \alpha_2 \cos(\alpha_2 x)$  mit  $x = 0$ , d.h.  $y'(0) = i 0,918 \cdot 2,6786 = 2,459 i$ . Da wir  $i$  außer Acht lassen müssen, haben wir als Anfangssteigung  $y'(0) = v = 2,459$  gewählt. Nur mit diesem Wert erhalten wir einen richtigen Normierungsfaktor.

Eine einfache Methode, aber von beschränkter Genauigkeit, ist das Verfahren von *Euler*, das wir ebenfalls für  $n = 2$  einsetzen wollen. Es ist wichtig, diese Werte mit denen nach *Runge-Kutta* zu vergleichen. Beachten Sie vor allem, dass der Graph sich ab  $z \approx 1,7$  von der  $z$ -Achse abwendet. Dieses unakzeptable Verhalten ist eine Folge der begrenzten Genauigkeit des *Euler*-schen Verfahrens.

- ```
reset()://Euler für n = 2
Euler:=proc(h,schritte)
begin
t:=0:i:=0:g:=1:
y:=0:v:=2.459:w:=0.1993:e:=36:
DIGITS:=5:
f:=(t,y)->-F*y(t):
for i from 0 to schritte do
if t>g-h then F:=e*(w-1)else F:=e*w end_if:
Y(i):=y:T(i):=t:
if (i=0) or (modp(i,20)=0) then
print("t= ",t,"y= ",y,"y'= ",v,"y' " ",f(t,y)):
end_if:
```

```

a:=f(t,y)//Psi''
y:=y+v*h://Psi
v:=v+a*h://Psi'
t:=t+h:
end_for:
p:=plot::Point2d(T(i),Y(i),Color=RGB::Red)
  $ i=1..schritte step 2:
plot(p,AxisTitles=["z","Psi(z)"]):
end_proc:
Euler(0.01,200):

```

```

"t= ", 0, "y= ", 0, "y'= ", 2.459, "y" ", 0
"t= ", 0.2, "y= ", 0.47188, "y'= ", 2.1299, "y" ", -3.3857
"t= ", 0.4, "y= ", 0.81745, "y'= ", 1.1951, "y" ", -5.865
"t= ", 0.6, "y= ", 0.93738, "y'= ", -0.090351, "y" ", -6.7255
"t= ", 0.8, "y= ", 0.79458, "y'= ", -1.3689, "y" ", -5.701
"t= ", 1.0, "y= ", 0.42555, "y'= ", -2.2797, "y" ", 12.266
"t= ", 1.2, "y= ", 0.14231, "y'= ", -0.74974, "y" ", 4.102
"t= ", 1.4, "y= ", 0.050541, "y'= ", -0.23069, "y" ", 1.4569
"t= ", 1.6, "y= ", 0.026284, "y'= ", -0.025386, "y" ", 0.75763
"t= ", 1.8, "y= ", 0.035817, "y'= ", 0.13708, "y" ", 1.0324
"t= ", 2.0, "y= ", 0.089008, "y'= ", 0.45956, "y" ", 2.5657

```

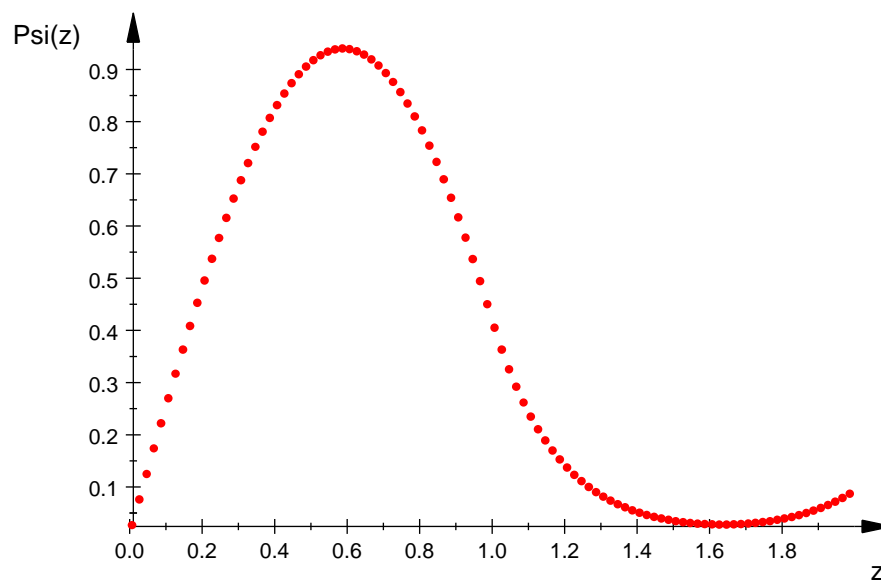


Fig. 8

4.5.4 Symmetrie und Normierung der Wellenfunktionen

Die Abbildungen zeigen, dass die Wellenfunktionen entweder gerade ($n = 1, 3$) oder ungerade ($n = 2, 4$) Symmetrie haben. Ich möchte gleich allgemein zeigen, dass die Funktionen (17) gerade oder ungerade *Parität* haben und dass man ψ_n durch geeignete Wahl von A reell machen kann. Zuerst aber möchte ich erklären, was man unter Parität versteht.

Die Funktionen $\psi_1, \psi_3, \psi_5 \dots$ sind gerade Funktionen von x , d.h. $\psi(-x) = \psi(x)$. In der Quantenmechanik sagt man, dass diese Funktionen positive (oder gerade) *Parität* besitzen. Die Eigenfunktionen $\psi_2, \psi_4, \psi_6 \dots$ sind ungerade Funktionen von x , also $\psi(-x) = -\psi(x)$. Sie haben also negative oder ungerade Parität. (Im Abschnitt 6.5.1 werden wir über die *Erhaltung der Parität* sprechen.)

Geometrisch bedeutet dies, dass die Wellenfunktion im Fall positiver Parität symmetrisch zur Geraden $x = 0$ ist. Im Fall negativer Parität ist die Eigenfunktion symmetrisch zum Ursprung.

Die Tatsache, dass die Eigenfunktionen eine definitive Parität besitzen (positiv oder negativ), ist eine Folge der Symmetrie des Potentials (bei unserer Wahl des Ursprungs ist das Potential eine gerade Funktion: $U(-x) = U(x)$).

In Gl. (17) führt ein ungerades n zu geraden und ein gerades n zu ungeraden Eigenfunktionen.

Hier sind nochmals die drei Teile der Eigenfunktion ψ_n (17):

$$\psi_n = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \text{ für } x \leq -a \quad (\text{I})$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n x) \pm \exp(-i\alpha_n x)), \text{ für } -a \leq x \leq a \quad (\text{II}) \quad (17)$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n a) \pm \exp(-i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha-x)), \text{ für } a \leq x \quad (\text{III})$$

Wir nehmen I und ersetzen x durch $-x$ im Fall des positiven Vorzeichens. Wir erhalten III mit positivem Vorzeichen.

Wenn wir in II, pos. Vorzeichen, x durch $-x$ ersetzen, verändert sich die Funktion nicht.

Wenn wir dasselbe mit III, pos. Vorzeichen, machen, ergibt sich I.

Wenn wir also in den drei Funktionen mit pos. Vorzeichen x durch $-x$ ersetzen, erhalten wir III, II, I.

Führen wir dasselbe mit den negativen Vorzeichen durch, ergeben sich -I, -II, -III. Das bedeutet, dass ψ_n gerade ist, wenn man das positive Vorzeichen nimmt, und dass ψ_n ungerade ist, wenn man das negative Zeichen wählt.

Wenn A reell ist, ist ψ_n komplex für das negative Zeichen. Wählt man das positive Zeichen, wird ψ_n reell (*Eulersche Formel*). Nimmt man A imaginär, $A = e^{i\varphi}$, so ist ψ_n reell, wenn wir I, II, III mit negativem Zeichen nehmen.

Jetzt fehlt noch die Berechnung des Faktors A . Ich hatte das Ergebnis schon bei Gl. (22) angegeben:

$$A = (a + 1/\beta)^{-1/2}/2 \quad (22)$$

Die Berechnung besteht in der Auswertung der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty, +\infty} \psi_n^* \psi_n dx = 1 \quad \text{oder}$$

$$\int_{-\infty, +\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty, -a} |\psi_l|^2 dx + \int_{-a, +a} |\psi_c|^2 dx + \int_{+a, \infty} |\psi_r|^2 dx = 1$$

Substitution liefert:

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a} [\int_{-\infty, -a} e^{2\beta x} dx + \int_{+a, \infty} e^{-2\beta x} dx] + \\ + \int_{-a, a} 2dx \pm \int_{-a, a} e^{2i\alpha x} dx \pm \int_{-a, a} e^{-2i\alpha x} dx \} = 1$$

Integration ergibt:

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a} [e^{2\beta x}/2\beta |_{-\infty, -a} + e^{-2\beta x}/-2\beta |_{+a, \infty}] + \\ + (2x |_{-a, a} \pm e^{2i\alpha x}/2i\alpha |_{-a, +a} \pm e^{-2i\alpha x}/-2i\alpha |_{-a, +a}) \} = 1$$

Einsetzung der Grenzen und Vereinfachung:

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a}/2\beta (e^{-2\beta a} + e^{-2\beta a}) + 4a \pm (e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a})/i\alpha \} = 1$$

$$A^2 (4a + 2/\beta \pm (e^{2i\alpha a} + e^{-2i\alpha a})/\beta \pm (e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a})/i\alpha) = 1$$

An dieser Stelle führen wir die Forderungen von Gl. (15) ein:

$$(\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) = -/+ 1 = (\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) \cdot \exp(-2i\alpha a) \quad (15a)$$

Damit ergeben sich

$$e^{2i\alpha a} = -/+ (\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha)$$

$$e^{-2i\alpha a} = -/+ (\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha)$$

$$e^{2i\alpha a} + e^{-2i\alpha a} = -/+ [(\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) + (\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha)] = -/+ (\beta^2 - \alpha^2)/(\beta^2 + \alpha^2)$$

$$e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a} = -/+ [(\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) - (\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha)] = \pm 4i\alpha\beta/(\alpha^2 + \beta^2)$$

und

$$A^2 [4a + 2/\beta \pm (-/+ 2/\beta (\beta^2 - \alpha^2)/(\alpha^2 + \beta^2)) \pm (\pm 4i\alpha\beta/i\alpha(\alpha^2 + \beta^2))] = 1$$

$$A^2 [4a + 2(1 - (\beta^2 - \alpha^2)/(\alpha^2 + \beta^2))/\beta \pm 4\beta/(\alpha^2 + \beta^2)] = 1$$

Mit dem positiven Vorzeichen folgt $A^2(4a + 4\beta^{-1}(\alpha^2 + \beta^2)/(\alpha^2 + \beta^2)) = 1$

und $|A| = 0.5 (a + \beta^{-1})^{-1/2}$, was unsere Gl. (22) ist.

4.5.5 Nochmals das Teilchen in seinem Kasten

Es war in Abschnitt 2.2, wo wir das Problem des Teilchens in einem linearen Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden studierten.

Wir können abschließend das Problem in 2.2 als Grenzfall eines Teilchens in einem endlich hohen Kasten, Bild 1, ansehen: Breite $2a$ und $U_0 \rightarrow \infty$.

In diesem Fall verwandelt sich Gl. (14) in

$$\text{tg}[2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}] = 0 \quad (23)$$

oder
$$2a(2mE/\hbar^2)^{1/2} = n\pi.$$

Das bedeutet für die möglichen Energieniveaus des eingesperrten Teilchens

$$E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 8a^2 m = n^2 h^2 / (32a^2 m), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

Für $n = 0$ ist ψ_0 gleich null, was bedeutet, dass kein Teilchen im Kasten ist.