

# LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.1

## Aufgabe 1

a.)

$$\langle \psi | (A^\dagger)^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^* = (\langle \psi | A | \phi \rangle^*)^* = \langle \psi | A | \phi \rangle \Leftrightarrow (A^\dagger)^\dagger = A. \quad (1)$$

b.)

$$\langle \psi | (\lambda A)^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \lambda A | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \phi | A | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle \Leftrightarrow (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger. \quad (2)$$

c.)

$$\langle \psi | (A+B)^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | A+B | \psi \rangle^* = \langle \phi | A | \psi \rangle^* + \langle \phi | B | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle + \langle \psi | B^\dagger | \phi \rangle \Leftrightarrow (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger. \quad (3)$$

d.)

Zunächst berechnen wir

$$\langle \psi | (AB)^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | AB | \psi \rangle^* = \langle \psi' | A^\dagger | \phi \rangle = \langle \psi' | \phi' \rangle, \quad (4)$$

wobei wir die Definitionen  $|\psi'\rangle \equiv B|\psi\rangle$  und  $|\phi'\rangle = A^\dagger|\phi\rangle$  verwendet haben. Weiterhin gilt dann:

$$\langle \psi' | \phi' \rangle = \langle \phi' | \psi' \rangle^* = \langle \phi' | B | \psi \rangle^* = \langle \psi | B^\dagger | \phi' \rangle = \langle \psi | B^\dagger A^\dagger | \phi \rangle, \quad (5)$$

und somit  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ .

## Aufgabe 2

a.)

$$H^\dagger = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^* = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = H. \quad (6)$$

Ja,  $H$  ist hermitesch :-). Kommen wir zu den Eigenwerten, die durch Nullsetzen des charakteristischen Polynoms folgen:

$$\begin{aligned} \det(E\mathbb{1}_3 - H) &= \det \begin{pmatrix} E & \hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 \\ \hbar\omega_0/\sqrt{2} & E & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ 0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} & E \end{pmatrix} = \\ &= E \det \begin{pmatrix} E & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ -\hbar\omega_0/\sqrt{2} & E \end{pmatrix} - \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \hbar\omega_0/\sqrt{2} & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ 0 & E \end{pmatrix} = \\ &= E \left( E^2 - \frac{\hbar^2\omega_0^2}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega_0^2}{2} E = E(E^2 - \hbar^2\omega_0^2) \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Hieraus ergeben sich die Eigenwerte

$$\boxed{E_1 = 0, \quad E_2 = \hbar\omega_0, \quad E_3 = -\hbar\omega_0.} \quad (8)$$

Nun zu den Eigenvektoren! Der  $i$ -te Eigenvektor soll mit  $\mathbf{e}^{(i)}$  bezeichnet werden. In der Basis  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  besitzt dieser die Darstellung

$$\mathbf{e}^{(i)} = c_1^{(i)} |u_1\rangle + c_2^{(i)} |u_2\rangle + c_3^{(i)} |u_3\rangle, \quad (9)$$

mit den Komponenten  $c_1^{(i)}$ ,  $c_2^{(i)}$  und  $c_3^{(i)}$ . In der Standarddarstellung

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

lässt sich der  $i$ -te Eigenvektor dann schreiben als

$$\mathbf{e}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ c_2^{(i)} \\ c_3^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

1.) Eigenvektor zu  $E_1 = 0$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & \hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 \\ \hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ 0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \\ c_3^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \\ c_3^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Der Rang der Matrix (die Anzahl linear unabhängiger Zeilen bzw. Spalten) ist also 2 und der Lösungsraum des Gleichungssystems damit eindimensional. Wir wählen als freie Konstante  $e_3$ . Aus der ersten Gleichung folgt  $e_2 = 0$  und aus der zweiten  $e_1 = e_3$ . Damit ergibt sich der Lösungsraum

$$\text{ER}_{E_1=0} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e_3, e_3 \in \mathbb{C} \right\}. \quad (14)$$

$e_3$  wird durch die Forderung nach Normierung des Eigenvektors zu  $1/\sqrt{2}$  festgelegt. Damit gilt nun:

$$\boxed{\text{EV}_{E_1=0} = \mathbf{e}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.} \quad (15)$$

2.) Eigenvektor zu  $E_2 = \hbar\omega_0$ :

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & \hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 \\ \hbar\omega_0/\sqrt{2} & \hbar\omega_0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ 0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \\ c_3^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \\ c_3^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Auch hier ist der Lösungsraum eindimensional und wir wählen als freie Konstante  $e_2$ . Aus der dritten Gleichung folgt dann  $e_3 = 1/\sqrt{2}e_2$  und aus der ersten Gleichung ergibt sich  $e_1 = -1/\sqrt{2}e_2$ .

$$\text{ER}_{E_2=\hbar\omega_0} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} e_2, e_2 \in \mathbb{C} \right\}. \quad (18)$$

Durch Normierung legen wir  $e_2$  fest auf  $1/\sqrt{2}$  und damit ist der normierte Eigenvektor gegeben durch:

$$\boxed{\text{EV}_{E_2=\hbar\omega_0} = \mathbf{e}^{(2)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.} \quad (19)$$

3.) Eigenvektor zu  $E_3 = -\hbar\omega_0$ :

$$\begin{pmatrix} -\hbar\omega_0 & \hbar\omega_0/\sqrt{2} & 0 \\ \hbar\omega_0/\sqrt{2} & -\hbar\omega_0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} \\ 0 & -\hbar\omega_0/\sqrt{2} & -\hbar\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(3)} \\ c_2^{(3)} \\ c_3^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(3)} \\ c_2^{(3)} \\ c_3^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Auch hier ist der Lösungsraum eindimensional und wir wählen als freie Konstante  $e_2$ . Aus der dritten Gleichung folgt dann  $e_3 = -1/\sqrt{2}e_2$  und aus der ersten Gleichung ergibt sich  $e_1 = 1/\sqrt{2}e_2$ .

$$\text{ER}_{E_2=\hbar\omega_0} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} e_2, e_2 \in \mathbb{C} \right\}. \quad (22)$$

Durch Normierung legen wir  $e_2$  fest auf  $1/\sqrt{2}$  und damit ist der normierte Eigenvektor gegeben durch:

$$\boxed{\text{EV}_{E_2=\hbar\omega_0} = \mathbf{e}^{(3)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}}. \quad (23)$$

b.)

Wir überprüfen die Orthogonalität der Eigenvektoren:  $\langle i|j \rangle = \delta_{ij}$ , wobei  $|i\rangle = \mathbf{e}^{(i)}$  der  $i$ -te Eigenvektor ist (in der Bra-Ket-Schreibweise).

$$\langle 1|2 \rangle = \mathbf{e}_1^T \cdot \mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0 \ 1) \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (1 \cdot (-1) + 0 \cdot \sqrt{2} + 1^2) = \boxed{0}, \quad (24)$$

$$\langle 1|3 \rangle = \mathbf{e}_1^T \cdot \mathbf{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0 \ 1) \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (-1 \cdot 1 + 0 \cdot \sqrt{2} + 1 \cdot (-1)) = \boxed{0}, \quad (25)$$

$$\langle 2|3 \rangle = \mathbf{e}_2^T \cdot \mathbf{e}_3 = \frac{1}{2} (-1 \ \sqrt{2} \ 1) \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} ((-1) \cdot 1 + (\sqrt{2})^2 + 1 \cdot (-1)) = \boxed{0}. \quad (26)$$

Nun noch zu der Vollständigkeit, die

$$\sum_{i=1}^3 |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}_3, \quad (27)$$

besagt.

$$|1\rangle\langle 1| = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1^T = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (1 \ 0 \ 1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$|2\rangle\langle 2| = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2^T = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (-1 \ \sqrt{2} \ 1) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & -1 \\ -\sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ -1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

$$|3\rangle\langle 3| = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3^T = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \cdot (1 \ \sqrt{2} \ -1) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & -1 \\ \sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ -1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Schlussendlich gilt also:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & -1 \\ -\sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ -1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & -1 \\ \sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ -1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \boxed{\mathbb{1}_3}, \tag{31}
 \end{aligned}$$

und die Vollständigkeit ist gewährleistet.

### Aufgabe 3

Wir unterteilen die  $x$ -Achse in drei Bereiche:

$$(1) : (-\infty, 0), \quad (2) : (0, d), \quad (3) : (d, +\infty). \tag{32}$$

Wegen  $E < 0$  und somit  $E < V$  handelt es sich bei den obigen drei Bereichen um klassisch verbotene Gebiete. Damit sind exponentiell ansteigende bzw. abfallende Lösungsansätze zu verwenden:

$$\psi_1(x) = A \exp(\varrho x), \quad \psi_2(x) = B \exp(\varrho x) + C \exp(-\varrho x), \quad \psi_3(x) = D \exp(-\varrho(x-d)), \tag{33a}$$

$$\varrho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{33b}$$

An den Punkten  $x = 0$  und  $x = d$  (wo das Potential durch eine  $\delta$ -Funktion beschrieben wird), muss die Wellenfunktion auf jeden Fall stetig sein. Damit lautet das erste Paar von Anschlussbedingungen:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Leftrightarrow A = B + C, \tag{34a}$$

$$\psi_2(d) = \psi_3(d) \Leftrightarrow B \exp(\varrho d) + C \exp(-\varrho d) = D. \tag{34b}$$

Die Forderung, dass auch die Ableitung der Wellenfunktion stetig (und damit die Wellenfunktion stetig differenzierbar ist), muss bei Potentials, die in bestimmten Punkten einen unendlichen Wert annehmen, fallen gelassen werden. Die Ableitung macht in diesen Fällen einen Sprung. Betrachten wir hierzu die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Potential der Form  $V(x) = -c\delta(x-d)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - c\delta(x-d)\psi(x) = E\psi(x). \tag{35}$$

Durch Integration über ein kleines Intervall  $[d-\varepsilon, d+\varepsilon]$  erhält man:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=d+\varepsilon} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=d-\varepsilon} \right) - c \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)\psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx, \tag{36}$$

woraus schließlich folgt:

$$\boxed{\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=d+} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=d-} = -\frac{2m}{\hbar^2} c\psi(0)}. \tag{37}$$

Angewendet auf das spezielle Problem hier mit den Ableitungen

$$\frac{d\psi_1}{dx} = A\varrho \exp(\varrho x), \quad \frac{d\psi_2}{dx} = B\varrho \exp(\varrho x) - C\varrho \exp(-\varrho x), \quad \frac{d\psi_3}{dx} = D\varrho \exp(\varrho x), \tag{38}$$

führt auf das nächste Paar von Anschlussbedingungen:

$$B - C - A = -\frac{2m}{\varrho\hbar^2} cA, \tag{39a}$$

$$-D - B \exp(\varrho d) + C \exp(-\varrho d) = -\frac{2m}{\varrho \hbar^2} cD. \quad (39b)$$

Wir erhalten somit folgendes lineares Gleichungssystem mit vier Unbekannten:

$$M \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & \exp(\varrho d) & \exp(-\varrho d) & -1 \\ -1 + 2mc/(\varrho \hbar^2) & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -\exp(\varrho d) & \exp(-\varrho d) & \exp(\varrho d) + 2mc/(\varrho \hbar^2) \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Das Gleichungssystem besitzt genau dann eine nichttriviale Lösung für den Lösungsvektor  $(A, B, C, D)^\top$ , wenn die Koeffizientendeterminante  $M$  verschwindet. Aus  $\det(M) = 0$  ergibt sich die angegebene Bedingung

$$\exp(-\varrho d) = \pm \left( 1 - \frac{\varrho \hbar^2}{mc} \right). \quad (41)$$

Dabei handelt es sich um eine transzendente Gleichung für  $\varrho$ , die sich durch elementare Umformungen nicht nach  $\varrho$  auflösen lässt. Wir unterscheiden deshalb zwei Fälle, nämlich  $\varrho d \ll 1$  und  $\varrho d \gg 1$ . Schauen wir uns zunächst  $\varrho d \ll 1$  an. Unter dieser Bedingung können wir die Exponentialfunktion auf der linken Seite (41) entwickeln und erhalten:

$$1 - \varrho d + \mathcal{O}((\varrho d)^2) = \pm \left( 1 - \frac{\varrho \hbar^2}{mc} \right). \quad (42)$$

1.) Pluszeichen auf der rechten Seite:

$$1 - \varrho d + \mathcal{O}((\varrho d)^2) = 1 - \frac{\varrho \hbar^2}{mc} \Rightarrow \varrho \left( d - \frac{\hbar^2}{mc} \right) + \mathcal{O}((\varrho d)^2) = 0. \quad (43)$$

Der erste Term verschwindet entweder für  $\varrho = 0$  oder  $d = \hbar^2/(mc)$ . Es müssen jedoch auch die Terme höherer Ordnung verschwinden, was nur für  $\varrho = 0$  möglich ist. Für  $\varrho = 0$  verschwindet jedoch die Energie und das ist nach der Aufgabenstellung ausgeschlossen, da nach Lösungen mit  $E < 0$  gesucht ist.

2.) Minuszeichen auf der rechten Seite:

$$1 - \varrho d = -1 + \frac{\varrho \hbar^2}{mc} \Rightarrow \varrho = \frac{2}{d + \frac{\hbar^2}{mc}}. \quad (44)$$

Damit folgt für die Energie

$$E = -\frac{\hbar^2 \varrho^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{4}{\left( d + \frac{\hbar^2}{mc} \right)^2} = \boxed{-\frac{2mc^2}{\hbar^2} \frac{1}{\left( \frac{dmc}{\hbar^2} + 1 \right)^2}}. \quad (45)$$

Die Bedingung  $\varrho d \ll 1$  ist wegen (44) äquivalent zu  $d \ll \hbar^2/(mc)$ . Im Falle  $d = 0$ , also wenn der Abstand zwischen den beiden  $\delta$ -Peaks verschwindet, folgt aus (45) die Energie eines einzigen  $\delta$ -förmigen Potentialtopfes mit einem zusätzlichen Faktor  $2c$ .

Für  $\varrho d \gg 1$  wird die Exponentialfunktion auf der linken Seite von (41) klein. Dann muss auch die rechte Seite klein sein. Deshalb setzen wir

$$1 - \frac{\varrho \hbar^2}{mc} = \alpha, \quad (46)$$

wobei  $\alpha$  klein ist. Daraus folgt durch Auflösen nach  $\varrho$

$$\varrho = \frac{mc}{\hbar^2} - \frac{mc}{\hbar^2} \alpha := \varrho_0 - \beta, \quad \varrho_0 = \frac{mc}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{mc}{\hbar^2} \alpha. \quad (47)$$

Einsetzen in Gleichung (41) führt auf

$$\exp(-\varrho_0 d)(1 + \beta d) = \pm \frac{\beta \hbar^2}{mc}, \quad (48)$$

und Auflösen nach  $\beta$  ergibt:

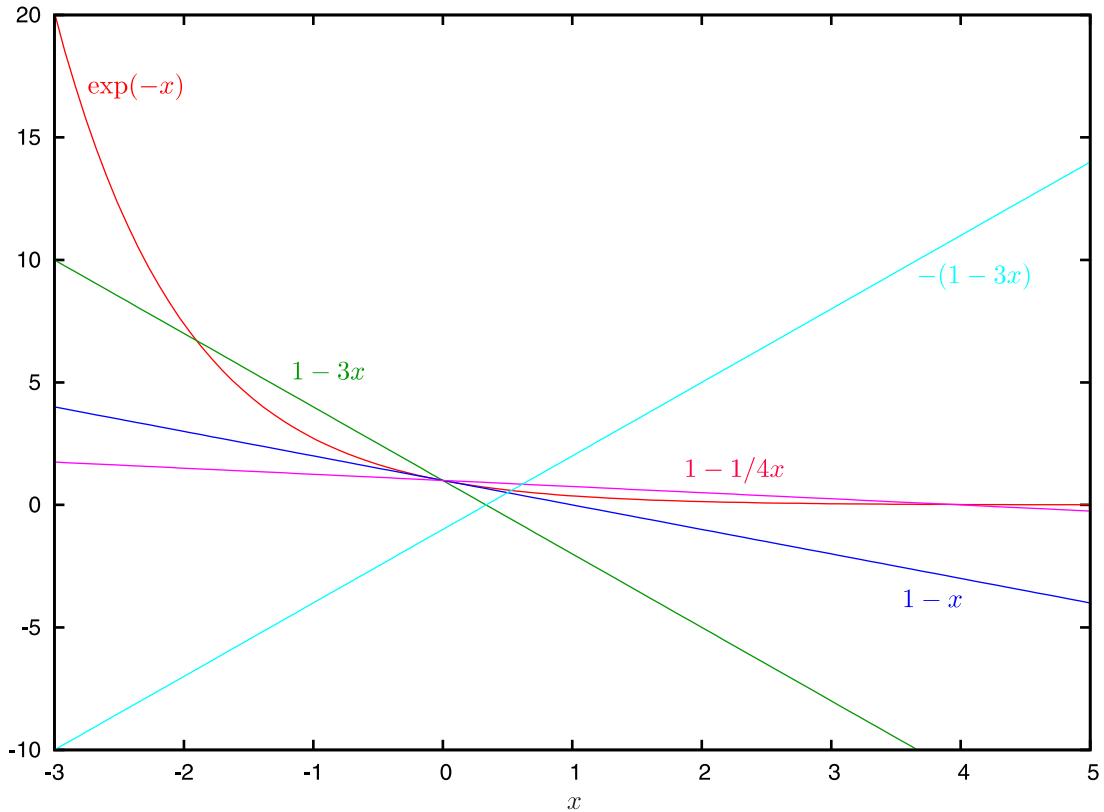
$$\beta = \frac{\exp(-\varrho_0 d)}{-d \exp(-\varrho_0 d) \pm \frac{\hbar^2}{mc}} = \frac{\exp(-\varrho_0 d) \varrho_0}{-\exp(-\varrho_0 d) \varrho_0 d \pm 1} \approx \pm \varrho_0 \exp(-\varrho_0 d). \quad (49)$$

Es gibt also zwei Lösungen für  $\varrho$  und für die Energie:

$$\varrho_{\pm} = \frac{mc}{\hbar^2} \left\{ 1 \mp \exp\left(-\frac{mcd}{\hbar^2}\right) \right\}, \quad E_{\pm} = -\frac{mc^2}{2\hbar^2} \left\{ 1 \mp \exp\left(-\frac{mcd}{\hbar^2}\right) \right\}^2. \quad (50)$$

Für  $d \mapsto \infty$  verschwindet die Exponentialfunktion und man erhält die Energie für einen einzelnen  $\delta$ -förmigen Potentialtopf. Es handelt sich um zwei Zustände zu derselben Energie  $E = -mc^2/(2\hbar^2)$ ; die Energie ist also zweifach entartet. Sind die beiden Potentialtöpfe unendlich weit voneinander entfernt, sind sie im Wesentlichen voneinander entkoppelt und bemerken sich gegenseitig nicht mehr. Die beiden Zustände entsprechen dann zwei orthogonalen Wellenfunktionen (je eine Wellenfunktion pro Potentialtopf). Wenn  $d$  kleiner wird, sich die beiden Potentialtöpfe also annähern, dann spaltet sich das entartete Energieniveau zu zwei verschiedenen Energieniveaus auf.  $E_+$  steigt dann immer weiter an und  $E_-$  sinkt ab. Dies passiert so lange, bis  $E_+$  einen kritischen Wert für  $d$  erreicht und positiv wird. Dieser kritische Wert folgt aus (41), in dem man die Gleichung graphisch löst. Dazu setzen wir  $x = \varrho d$  und erhalten somit

$$f(x) = \pm g(x), \quad f(x) = \exp(-x), \quad g(x) = 1 - \frac{\hbar^2}{mcd} x. \quad (51)$$



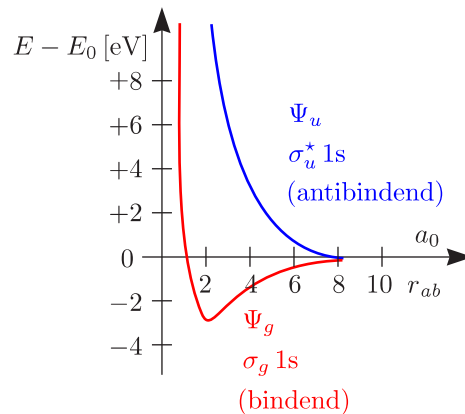
Die Gleichung mit dem Minuszeichen besitzt stets eine Lösung  $x > 0$  (und damit  $\varrho > 0$ ) für alle Steigungen. Die Gleichung mit dem Pluszeichen besitzt mindestens eine Lösung und zwar  $x = 0$  und somit  $\varrho = 0$ . Aus  $\varrho = 0$  folgt jedoch  $E = 0$  und damit scheidet diese Lösung aus, da wir nach gebundenen Zuständen mit  $E < 0$  suchen. Je nachdem, wie die Steigung der Geraden  $g(x)$  ist in Bezug auf die Steigung der Exponentialfunktion  $f(x) = \exp(-x)$  am Nullpunkt gibt es eine weitere Lösung mit  $x > 0$  ( $\varrho > 0$ ) oder  $x < 0$  ( $\varrho < 0$ ). Für einen Schnittpunkt bei  $x < 0$  muss

$$f'(x=0) < g'(x=0) \Leftrightarrow -\exp(-x)|_{x=0} < -\frac{\hbar^2}{mcd} \Leftrightarrow d > \frac{\hbar^2}{mc}, \quad (52)$$

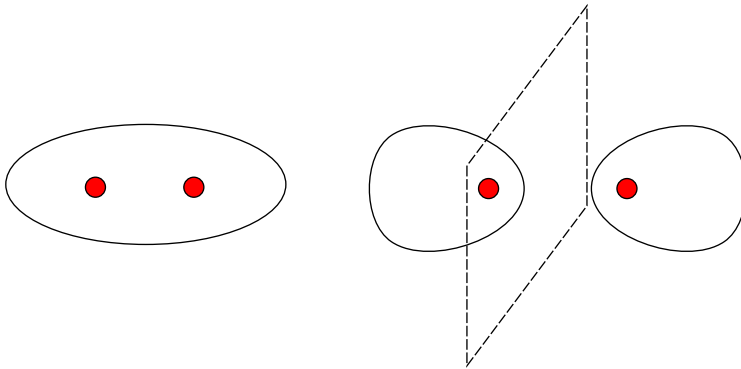
sein. Diese weitere Lösung besitzt jedoch keine physikalische Bedeutung, da  $\varrho \geq 0$  sein muss. Eine Lösung mit  $\varrho > 0$  gibt es dann für

$$d > d_{\text{krit}}, \quad d_{\text{krit}} = \frac{\hbar^2}{mc}. \quad (53)$$

Dieses Modell ist schon eine sehr gute Näherung für ein einfaches zweiatomiges Molekül, wie beispielsweise das Wasserstoffmolekül  $\text{H}_2$ . Für große Abstände gibt es zwei Zustände mit  $E < 0$ . Der mit niedrigerer Energie, also  $E_-$ , ist der stabilere und man nennt diesen den **bindenden Zustand**. Der mit höherer Energie, also  $E_+$ , ist instabil und der sogenannte **antibindende Zustand**.



Diese Zustände sind dann nichts anderes als die aus der Atom- und Molekülphysik bekannten Orbitale:



Wie schon oben erwähnt, ist das bindende Orbital (links) energetisch stabiler als das antibindende (rechts). Im bindenden Orbital ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der beiden Elektronen zwischen den Atomkernen am größten. Die Elektronen dienen also gewissenmaßen als Kitt und schirmen die Ladung der positiv geladenen Kerne (und damit die Coulombsche Kraft) gegeneinander ab, womit die Kerne zusammengehalten werden.

Beim antibindenden Orbital ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am Rand größer als zwischen den Atomkernen. Diese Konfiguration ist instabil; die Kernladungen werden nicht gegeneinander abgeschirmt und die die Elektronen ziehen die Kerne buchstäblich auseinander. Dass die Konfiguration energetisch instabiler ist, erkennt man auch daran, dass es eine Knotenebene zwischen den beiden Kernen gibt, also ein Bereich, wo die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der beiden Elektronen verschwindet. Analog zu Seilwellen in der klassischen Mechanik steigt die Anzahl der Knoten (und Bäuche) mit zunehmender Frequenz/Energie an (Grundschiwingung, 1.Oberschiwingung, 2.Oberschiwingung, ...).

Berücksichtigt man zusätzlich die Spins der beiden Elektronen, so ist nach dem Pauliprinzip klar, dass zwei Elektronen nur dann den bindenden Zustand besetzen können, wenn sie eine entgegengesetzt gerichtete  $z$ -Komponente des Spins haben (antiparallele Einstellung). Ist die  $z$ -Komponente gleich, so wechselt eines der beiden Elektronen in das antibindende Orbital und es kann sich kein  $\text{H}_2$ -Molekül bilden.

Das Doppelmuldenpotential besitzt auch andere Anwendungen, beispielsweise um das Tunneln des N-Atoms im Ammoniakmolekül ( $\text{NH}_3$ ) durch die Ebene zu beschreiben, die von den drei H-Atomen aufgespannt wird:

