

A. Chassé, W. Hergert

Einführung in die Quantenphysik

Nutzung des online Materials

2. Juni 2013

Springer

Inhaltsverzeichnis

1	Nutzungshinweise	1
1.1	Erzeugen ROBODoc Dokumentation	1
1.2	Mathematica	1
2	Mathematica Notebooks	3
2.1	Übersicht	3
2.2	Notebooks zum Buch - MB#	4
2.2.1	MB2: Transfermatrixmethode	4
2.2.2	MB3: Die WKB-Methode	10
2.2.3	MB5: Resonanzstreuung	13
2.2.4	MB7: Störungsrechnung	19
2.2.5	MB9: Kugelflächenfunktionen und Orbitale	23
2.2.6	MB12: Die Numerov-Methode	23
2.3	Zusätzliche Notebooks - MZ#	25
2.3.1	MZ1: Gebundene Zustände im δ -Potential	25
2.3.2	MZ2: Potentialtopf mit δ -Störung	28
	Sachverzeichnis	33
	Literaturverzeichnis	34

Kapitel 1

Nutzungshinweise

Das gesamte Material ist im Archiv *quantenphysik.tar.gz* enthalten. Nach dem Auspacken steht Ihnen das ganze Material unter der HTML-Seite *quantenphysik.html* zur Verfügung. Diese kann man mit den scripts *show.bat*, *show.mac*, *show.linux* direkt anzeigen. Über diese Seite können Sie diese Hinweise und das Lösungsbuch der Aufgaben, sowie die Dokumentation der Mathematica-Befehle, die für die Nutzung in den Notebooks neu definiert worden sind, einsehen. Sollten Sie zum Paket **QPack** neue Befehle hinzufügen, so können Sie mit dem Dokumentationswerkzeug ROBODoc die Dokumentation erneuern (siehe Hinweise unten).

1.1 Erzeugen ROBODoc Dokumentation

Das Hauptverzeichnis enthält ein *makefile*. Mit diesem können Sie die HTML-Seiten des Pakets für Linux und Mac-Betriebssysteme anzeigen und die ROBODoc-Dokumentation des Paketes **QPack** erneuern. Dafür wird zuerst das ROBODoc-Paket lokal im Verzeichnis aus den Quellen installiert (*make robodoc*). Danach kann man die Code-Dokumentation erneuern (*make doc_math*).

1.2 Mathematica

Die Notebooks wurden mit den Mathematica-Versionen 8 und 9 entwickelt und getestet. Im Paket enthalten sie die mit Mathematica 9 abschließend getesteten Notebooks. Bei Verwendung älterer Versionen kann es somit kleine Probleme geben, die geringfügige Anpassungen erforderlich machen.¹ Die Mathematica Notebooks sind in ausgeführter Form abgespeichert und über die HTML-Seiten sofort einsehbar, falls der frei verfügbare *Wolfram CDF Player* installiert ist. Besitzen die Notebooks

¹ In älteren Versionen gibt es zum Beispiel die Option **PlotLegends** für die Plotbefehle nicht.

interaktive Elemente, so sind diese auch noch im CDF-Format abgespeichert. Dann kann man mit dem CDF-Player die interaktiven Elemente auch ausführen.

Viele Anregungen findet man auch im **Wolfram Demonstration Project** (<http://demonstrations.wolfram.com>).

Kapitel 2

Mathematica Notebooks

2.1 Übersicht

Die im Moment vorhandenen Notebooks sind in den Tabellen noch einmal genannt. Auf die Notebooks in Tabelle 2.1 wird im Buch Bezug genommen. Die Notebooks in Tabelle 2.3 beziehen sich auf Übungsaufgaben. Notebooks in Tabelle 2.2 beinhalten Zusatzmaterial. Dieses wird bei Gelegenheit ergänzt. Zu einigen Notebooks sind Ergänzungen zum im Buch gebotenen Stoff erforderlich. Es ist unzweckmäßig dieses Material im Notebook unterzubringen. Aus diesem Grund werden die entsprechenden Erläuterungen hier angefügt.

<i>Notebook</i>	<i>Kapitel</i>	<i>Inhalt</i>
MB1	2.2.1	Potentialtopf
MB2	2.2.1	Transfermatrixmethode
MB3	2.2.3	Beliebige Potentiale und WKB-Näherung
MB4	2.3.3	Reflexion und Streuung an Potentialtopf und Schwelle
MB5	2.3.5	Streuphasen und Resonanz-Streuung
MB6	2.4.2	Ritzsches Variationsverfahren
MB7	2.4.3	Störungsrechnung
MB8	3.3.1	Zerfallswahrscheinlichkeit, Berechnung der Zustände
MB9	4.2.4	Kugelflächenfunktionen
MB10	4.3.3	Radiale Wellenfunktionen im Wasserstoffatom
MB11	4.3.4	Wasserstoffatom im Potentialtopf
MB12	4.3.4	Numerov-Methode

Tabelle 2.1 *Mathematica* Notebooks zum Buch.

Notebook	Kapitel	Inhalt
MZ1	2.2	Gebundene Zustände in δ -Potentiale
MZ2	2.4	δ -Störung im Potentialtopf

Tabelle 2.2 Zusätzliche *Mathematica* Notebooks. Die Notebooks sind Ergänzungen zu den jeweils genannten Kapiteln

Notebook	Kapitel	Aufgabe	Inhalt
MA1	2.2	2.4	Num. Integration der 1D-Schrödingergleichung
MA2	2.2	2.6	Doppelmulde
MA3	2.3	2.9	Streuung am 1D-Potentialtopf

Tabelle 2.3 *Mathematica* Notebooks zu den Übungsaufgaben.

2.2 Notebooks zum Buch - MB#

2.2.1 MB2: Transfermatrixmethode

Die Berechnung von gebundenen Zuständen und Streuzuständen für beliebig stückweise lineares Potential soll nun näher untersucht werden (vergl. [1, 2, 3]). Voraussetzungen für die folgende Ableitung sind

1. Für $x \rightarrow \pm\infty$ ist das Potential konstant.

$$V(x) = V_L \quad x \leq x_0 \quad , \quad V(x) = V_R \quad x \geq x_N$$

2. Gebundene Zustände, die hier berechnet werden sollen, treten nur für

$$E < \min(V_L, V_R)$$

auf.

3. Streuzustände werden mit der Transfermatrixmethode für

$$E > \min(V_L, V_R)$$

berechnet.

4. Die Bandstruktur im Falle periodischer Potentiale kann berechnet werden.
5. Das Verfahren ist leicht auf die Betrachtung effektiver Massen zu erweitern.

2.2.1.1 Allgemeine Formulierung

Das Potential ist im Gebiet $[x_0, x_N]$ stückweise linear vorgegeben. Mit den in Abb. 2.1 eingeführten Bezeichnungen ist das Potential im Intervall i gegeben als,

$$V(x) = \frac{(V_{i+1} - V_i)}{(a_{i+1} - a_i)} (x - a_i) + V_i \quad \text{für} \quad a_i \leq x \leq a_{i+1} \quad (2.1)$$

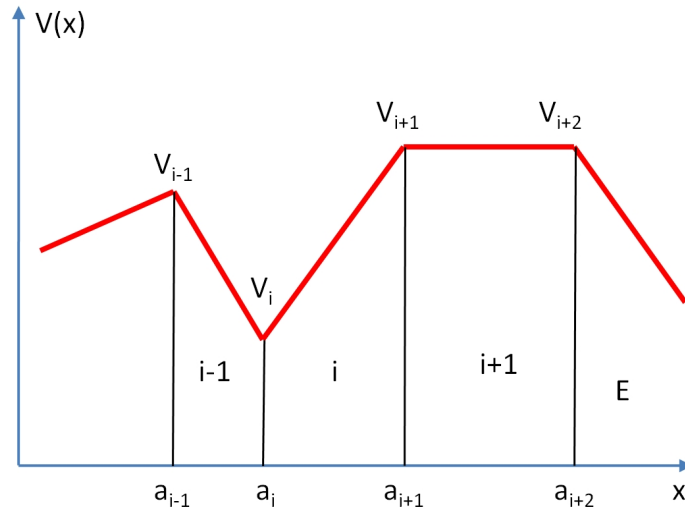


Abb. 2.1 Stückweise lineares Potential

Das Potential wird durch Einführung einer "lokalen Feldstärke" F_i

$$F_i = -\frac{(V_{i+1} - V_i)}{(a_{i+1} - a_i)} \quad (2.2)$$

geschrieben als

$$V(x) = -F_i(x - b_i) \quad , \quad b_i = a_i + \frac{V_i}{F_i} \quad (2.3)$$

Das Potential wird also im Intervall i , d.h. $[a_i, a_{i+1}]$, dargestellt durch

$$V(x) = -F_i(x - b_i) \quad (2.4)$$

$$F_i = -\frac{(V_{i+1} - V_i)}{(a_{i+1} - a_i)} \quad , \quad b_i = a_i + \frac{V_i}{F_i} \quad (2.5)$$

Die SG hat also im Intervall $[a_i, a_{i+1}]$ die folgende Gestalt

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (-F_i x + F_i b_i - E) \right] \phi(x) = 0 \quad . \quad (2.6)$$

Die folgende Transformation überführt die DGL (2.6) in die DGL der **Airy-Funktionen**.¹

$$z = r_i(c_i - x) \quad , \quad r_i = \left(\frac{2mF_i}{\hbar} \right)^{1/3} \quad , \quad c_i = a_i + \frac{(V_i - E)}{F_i} \quad (2.7)$$

¹ Die Airy-Funktionen sind in Mathematica implementiert, so dass man sich dort einen Überblick über Eigenschaften der Airy-Funktionen verschaffen kann.

Die Durchführung der Transformation führt auf

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - z \right] u_i = 0 \quad . \quad (2.8)$$

Lösungen der DGL (2.8) sind die Airy-Funktionen $Ai(z), Bi(z)$. Die Lösung im Intervall $[a_i, a_{i+1}]$ lässt sich also als Linearkombination der Airy-Funktionen schreiben

$$u_i(x) = C_i^{(1)} Ai(z_i) + C_i^{(2)} Bi(z_i) \quad (2.9)$$

$$z_i = r_i (c_i - x) \quad (2.10)$$

Die Forderung nach Stetigkeit von Funktion und Ableitung an den Intervallgrenzen führt auf zwei Gleichungen

$$\begin{aligned} c_{i-1}^{(1)} Ai(z_{i-1,i}) + c_{i-1}^{(2)} Bi(z_{i-1,i}) &= c_i^{(1)} Ai(z_{i,i}) + c_i^{(2)} Bi(z_{i,i}) \quad (2.11) \\ c_{i-1}^{(1)} \frac{d}{dz} Ai(z)|_{z_{i-1,i}} + c_{i-1}^{(2)} \frac{d}{dz} Bi(z)|_{z_{i-1,i}} &= c_i^{(1)} \frac{d}{dz} Ai(z)|_{z_{i,i}} + c_i^{(2)} \frac{d}{dz} Bi(z)|_{z_{i,i}} \end{aligned}$$

In (2.11) bedeutet $z_{i,j} = r_i(c_i - a_j)$. Die Gleichungen (2.11) lassen sich in Matrixschreibweise schreiben, wobei die Entwicklungskoeffizienten als Spaltenvektor $\mathbf{C}_i = \left(c_i^{(1)}, c_i^{(2)} \right)^T$ aufgefasst werden. Man erhält

$$\mathbf{M}_{i-1}(z_{i-1,i}) \mathbf{C}_{i-1} = \mathbf{M}_i(z_{i,i}) \mathbf{C}_i \quad (2.12)$$

\mathbf{M} sind die sogenannten **Transfermatrizen**, welche entsprechend (2.11) als

$$\mathbf{M}_i(z) = \begin{pmatrix} Ai(z) & Bi(z) \\ -r_i \frac{d}{dz} Ai(z) & -r_i \frac{d}{dz} Bi(z) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

definiert sind. Mit Hilfe der Transfermatrizen lassen sich alle Gleichungen für die Intervallgrenzen, die zur Bestimmung aller unbekannten Entwicklungskoeffizienten dienen aufschreiben, z.B.

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{i-1}(z_{i-1,i}) \mathbf{C}_{i-1} &= \mathbf{M}_i(z_{i,i}) \mathbf{C}_i \\ \mathbf{M}_i(z_{i,i+1}) \mathbf{C}_i &= \mathbf{M}_{i+1}(z_{i+1,i+1}) \mathbf{C}_{i+1} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{M}_{i+1}(z_{i+1,i+2}) \mathbf{C}_{i+1} = \mathbf{M}_{i+2}(z_{i+2,i+2}) \mathbf{C}_{i+2} :$$

Setzt man die Gleichungen ineinander ein, kann man die Koeffizienten im Intervall i mit denen im Intervall $i+2$ direkt verknüpfen. Man erhält

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{i-1}(z_{i-1,i}) \mathbf{C}_{i-1} &= \mathbf{M}_i(z_{i,i}) \cdot \mathbf{M}_i^{-1}(z_{i,i+1}) \cdot \mathbf{M}_{i+1}(z_{i+1,i+1}) \cdot \\ &\cdot \mathbf{M}_{i+1}^{-1}(z_{i+1,i+2}) \cdot \mathbf{M}_{i+2}(z_{i+2,i+2}) \mathbf{C}_{i+2} \quad . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Führt man diesen Prozess nun ausgehend von $x < a_0$ bis $x > a_N$ durch, erhält man

$$\mathbf{M}_L(P, Q)^T = \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}_R(R, S)^T \quad (2.16)$$

$\mathbf{M}_L, \mathbf{M}_R$ sind die entsprechenden Matrizen in den Bereichen konstanten Potentials V_L, V_R .

2.2.1.2 Gebundene Zustände

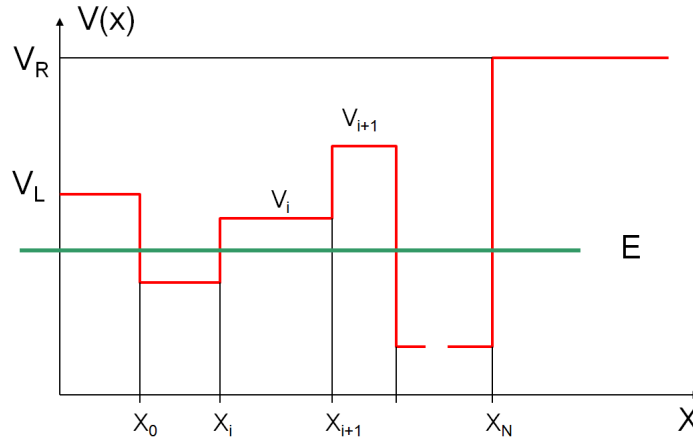


Abb. 2.2 Berechnung gebundener Zustände im stückweise konstanten Potential

Die Wellenfunktionen im Bereich der konstanten Potentiale V_L, V_R sind dabei gegeben durch

$$u_L = P e^{k_L(x-a_0)} + Q e^{-k_L(x-a_0)} \quad (2.17)$$

$$u_R = R e^{k_R(x-a_N)} + S e^{-k_R(x-a_N)} \quad (2.18)$$

Dabei sind $k_L = \sqrt{2m(V_L - E)/\hbar^2}$, $k_R = \sqrt{2m(V_R - E)/\hbar^2}$. Die Transfermatrizen $\mathbf{M}_L, \mathbf{M}_R$ sind durch

$$\mathbf{M}_L = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k_L & -k_L \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k_R & -k_R \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

gegeben. Gleichung (2.16) lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} (P, Q)^T &= \mathbf{M}_L^{-1} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}_R(R, S)^T \\ &= \bar{\mathbf{M}}(R, S)^T \end{aligned} \quad (2.20)$$

Auf Grund der Forderung nach Normierbarkeit muss gelten $Q = R = 0$. Somit folgt aus (2.20) als Bedingung für die Existenz eines gebundenen Zustandes

$$\bar{m}_{22}(E) = 0 \quad . \quad (2.21)$$

Bestimmung der gebundenen Zustände mit der Transfermatrixmethode heißt also, Nullstellen des Elements \bar{m}_{22} in Abhängigkeit von der Energie zu suchen. Spezialisiert man die Transfermatrixmethode auf stückweise konstantes Potential (vergl. Abb. 2.2) sind die linear unabhängigen Lösungen in den Intervallen einfacher und die Transfermatrizen haben die allgemeine Gestalt

$$\mathbf{M}_i(x_{i,j}) = \begin{pmatrix} e^{k_i x_{i,j}} & e^{-k_i x_{i,j}} \\ k_i e^{k_i x_{i,j}} & -k_i e^{-k_i x_{i,j}} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

mit $x_{i,j} = x_i - x_j$ und $k_i = \sqrt{2m(V_i - E)/\hbar^2}$.

2.2.1.3 Streuzustände

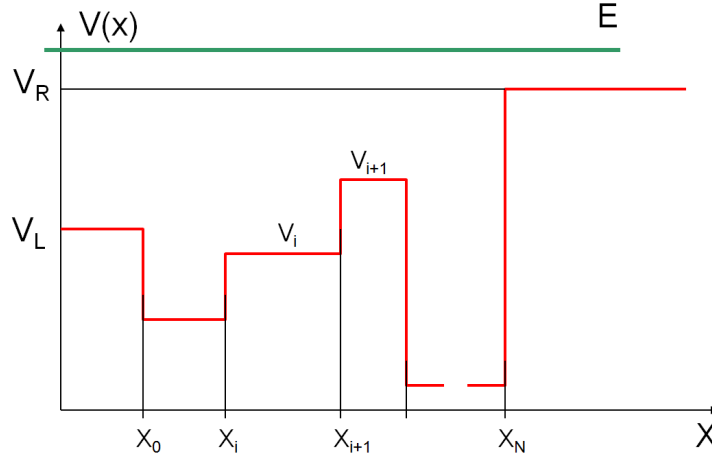


Abb. 2.3 Berechnung von Streuzuständen im stückweise konstanten Potential

Von links läuft ein Teilchenstrom mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte \mathbf{j}_L ein. In Abb. 2.3 ist die Situation für stückweise konstantes Potential dargestellt. Im Ergebnis des Streuprozesses erhält man einen durchgelassenen Teilchenstrom \mathbf{j}_T und einen reflektierten Teilchenstrom \mathbf{j}_R . Es sollen von rechts keine Teilchen einlaufen. Deshalb gilt in (2.16) $S = 0$. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichten sind durch

$$\mathbf{j}_L|_{x=x_0} = |P|^2 \kappa_L \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{j}_R|_{x=x_0} = -|Q|^2 \kappa_L \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{j}_T|_{x=x_N} = |U|^2 \kappa_R \mathbf{e}_x \quad (2.23)$$

mit $\kappa_R = \sqrt{2m(E - V_R)/\hbar^2}$, $\kappa_L = \sqrt{2m(E - V_L)/\hbar^2}$ gegeben. Aus (2.23) erhält man damit für die quantenmechanischen Transmission- und Reflexionskoeffizienten:

$$T = \frac{|\mathbf{j}_T|}{|\mathbf{j}_L|} = \frac{|U|^2}{|P|^2} \frac{\kappa_R}{\kappa_L}, \quad R = \frac{|\mathbf{j}_R|}{|\mathbf{j}_L|} \frac{|Q|^2}{|P|^2}. \quad (2.24)$$

Unter Verwendung von (2.16) erhält man letztlich

$$T(E) = \frac{1}{|\tilde{m}_{11}(E)|^2} \frac{\kappa_R}{\kappa_L}, \quad R(E) = \frac{|\tilde{m}_{21}(E)|^2}{|\tilde{m}_{11}(E)|^2}. \quad (2.25)$$

2.2.1.4 Periodische Potentiale

Das vorgegebene Potential ist jetzt periodisch, so dass gilt: $V(x) = V(x + L)$. Innerhalb der Elementarzelle besteht das Potential aus N konstanten Abschnitten. Beginnt die Elementarzelle am Orte x_i und endet am Orte x_{i+N} , so erhält man bei Verwendung des Bloch-Theorems:

$$\mathbf{M}_{i+N-1}(x_{i+N}) \mathbf{C}_{i+N-1} = \mathbf{M}_i(x_i) e^{iKL} \mathbf{C}_i. \quad (2.26)$$

Dabei ist K der Betrag des eindimensionalen Wellenvektors. Durch Gleichung vom Typ (2.14) kann man die Verknüpfung der Koeffizienten über die Elementarzelle hinweg auswerten und erhält

$$\{\mathbf{M}_i(x_{i+1}) - \mathbf{M}_{i+1}(x_{i+1}) \mathbf{M}_{i+1}^{-1}(x_{i+2}) \dots \mathbf{M}_{i+N-1}^{-1}(x_{i+N}) \mathbf{M}_i(x_i) e^{iKL}\} \mathbf{C}_i = 0, \\ \tilde{\mathbf{M}} \mathbf{C}_i = 0. \quad (2.27)$$

Das homogene lineare Gleichungssystem (2.27) hat nur dann nichttriviale Lösungen, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet

$$\det \tilde{\mathbf{M}} = 0. \quad (2.28)$$

2.2.1.5 Effektive Massen

Bei Halbleitermikrostrukturen bildet sich in der Valenzbandoberkante eine Potentialtopfstruktur heraus, die mit der Transfermatrix-Methode behandelt werden kann. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass im Rahmen der Effektivmassennäherung die unterschiedlichen effektiven Massen der Elektronen in den einzelnen Schichten berücksichtigt werden müssen. So muss man für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ für $x = 0.5$ die effektiven Massen $m_{\text{GaAs}}^* = 0.067$, $m_{\text{AlGaAs}}^* = 0.1087$ berücksichtigen. Für das Elektron im i -ten Intervall lautet die Schrödinger-Gleichung dann

$$\left[-\frac{1}{2m_i^*} \frac{d^2}{dx^2} + V_i \right] \phi_i(x) = (E - E_0) \phi_i(x). \quad (2.29)$$

Dabei ist E_0 eine in Halbleitermikrostrukturen mit der Bewegung senkrecht zur Schichtfläche verbundene Energie, die durch die freie Bewegung der Elektronen

$$E_0 = \frac{1}{2m_i^*} (k_y^2 + k_z^2) \quad (2.30)$$

gegeben ist. Diese wird in der Implementierung nicht mit berücksichtigt.

Die Forderung der Stetigkeit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte über die Grenzfläche führt auf:

$$\frac{1}{2m_{i-1}^*} \frac{d}{dx} \phi_{i-1}(x)|_{x=x_i} = \frac{1}{2m_i^*} \frac{d}{dx} \phi_i(x)|_{x=x_i} \quad (2.31)$$

Damit ergibt sich die gegenüber (2.19), (2.22) geänderte Form der Transformmatrix

$$\mathbf{M}_i(x_j) = \begin{pmatrix} \phi_i^1(x) & \phi_i^2(x) \\ \frac{1}{2m_i^*} \frac{d}{dx} \phi_i^1(x)|_{x=x_j} & \frac{1}{2m_i^*} \frac{d}{dx} \phi_i^2(x)|_{x=x_j} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Dabei sind $\phi_i^1(x), \phi_i^2(x)$ die zwei linear unabhängigen Lösungen im i -ten Intervall.

2.2.2 MB3: Die WKB-Methode

Die Grundidee der WKB-Näherung ist im Buch im Kapitel 2.2.3. *Bewegung im beliebigen Potentialtopf* bereits dargestellt. Hier soll die Methode jetzt etwas detaillierter beschrieben werden. Die Diskussion folgt den ausführlichen Erläuterungen in [4]. Wir gehen von der eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödingergleichung aus²

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right] \phi(x) = 0, \quad k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) . \quad (2.33)$$

Zur Lösung der Gleichung wird der Ansatz

$$\phi(x) = c e^{iW(x)/\hbar} \quad (2.34)$$

gemacht. $W(x)$ hat die Dimension einer Wirkung. Gleichung (2.33) wird mit dem Ansatz (2.34) auf eine Differentialgleichung für $W(x)$ zurückgeführt. Man erhält

$$\left(\frac{d}{dx} W(x) \right)^2 - (i\hbar) \frac{d^2}{dx^2} W(x) = \hbar^2 k(x) . \quad (2.35)$$

Es liegt eine inhomogene, nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung in $W(x)$ vor. Da der Übergang vom Quantenmechanik zur klassischen Mechanik durch

² Dreidimensionale Probleme, z.B. die Bewegung im Zentralkraftfeld, lassen sich durch Separation oft auf eine eindimensionale Bewegung in einem Effektivpotential zurückführen.

$\hbar \rightarrow 0$ vermittelt wird, ist es deshalb natürlich $W(x)$ nach Potenzen von $(i\hbar)$ entwickeln:

$$W(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (i\hbar)^n W_n(x) . \quad (2.36)$$

Für die Funktionen $W_n(x)$ erhält man bis zur zweiten Ordnung:

$$W_0 = \pm \hbar \int^x d\xi k(\xi) , \quad (2.37)$$

$$W_1(x) = \ln \sqrt{k(x)} , \quad (2.38)$$

$$W_2(x) = \pm \frac{1}{4\hbar} \int^x d\xi \left(\frac{k''(\xi)}{k^2(\xi)} - \frac{3}{2} \frac{k'^2(\xi)}{k^3(\xi)} \right) . \quad (2.39)$$

In der WKB-Näherung wird nun die Entwicklung nach dem linearen Term abgebrochen. Man erhält die folgende Linearkombination der Teillösungen.

$$\phi^{WKB}(x) = \frac{c_+}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int^x d\xi k(\xi)} + \frac{c_-}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int^x d\xi k(\xi)} . \quad (2.40)$$

Diskussion:

- Bei $V(x) = \text{konst.}$ erhält man in (2.40) eine Linearkombination ebener Wellen und damit das exakte Ergebnis.
- Bei schwach ortsabhängigem Potential erhält man näherungsweise eine schwach ortsabhängige Phase.
- Die Näherung (2.40) kann nicht nur im klassisch erlaubten Bereich ($E > V(x)$) sondern auch im klassisch verbotenen Bereich ($E < V(x)$) verwendet werden. Mit $k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))/\hbar^2} = i\sqrt{2m(V(x) - E)/\hbar^2} = i\kappa$ erhält man in (2.40) exponentiell ansteigende oder abklingende Funktionen.
- Die WKB Funktion erfüllt die Gleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi^{WKB}(x) + \left\{ k^2(x) + \frac{1}{2} \left(\frac{k''(x)}{k(x)} - \frac{3}{4} \frac{k'^2(x)}{k^2(x)} \right) \right\} \phi^{WKB}(x) = 0 . \quad (2.41)$$

Der Vergleich mit (2.33) zeigt, dass die WKB-Näherung offensichtlich gut ist, wenn

$$\left| \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{k''(x)}{k(x)} - \frac{3}{4} \frac{k'^2(x)}{k^2(x)} \right)}{k^2(x)} \right| \ll 1 \quad (2.42)$$

gilt.

- Da in der Nähe der klassischen Umkehrpunkte $k(x) \approx 0$ gilt, ist dort (2.40) auf Grund von (2.42) offensichtlich keine gute Näherung.

Man kann also (2.40) verwenden eine Näherungsfunktion zu konstruieren, muss aber in der Nähe der klassischen Umkehrpunkte ein geeignetes Verfahren finden, um die Wellenfunktionen in den einzelnen Gebieten aneinander anpassen zu können. Ein solches Verfahren wird durch Langer [5] angegeben. Man kann eine neue

Variable α einführen:

$$\alpha = \begin{cases} \int_{x_{\pm}}^x k(\xi) d\xi, & x \geq x_{\pm} \\ \int_x^{x_{\pm}} k(\xi) d\xi, & x \leq x_{\pm} \end{cases} . \quad (2.43)$$

Die WKB-Funktion (2.40) lautet in der neuen Variablen

$$\tilde{\phi}^{WKB}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{k(\alpha)}} (c_1 e^{i\alpha} + c_2 e^{-i\alpha}), \quad E > V, \quad (2.44)$$

$$\tilde{\phi}^{WKB}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{|k(\alpha)|}} (c_1 e^{|\alpha|} + c_2 e^{-|\alpha|}), \quad E < V. \quad (2.45)$$

Die WKB-Funktionen (2.44), (2.45) als Funktionen von α erfüllen die folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{\phi}^{WKB}}{d\alpha^2} + \frac{1}{k} \frac{dk}{d\alpha} \frac{d\tilde{\phi}^{WKB}}{d\alpha} + \left(1 - \frac{1}{4k^2} \left(\frac{dk}{d\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2k} \frac{d^2 k}{d\alpha^2} \right) \tilde{\phi}^{WKB} &= 0 \\ \ddot{\phi}^{WKB} + \frac{\dot{k}}{k} \dot{\phi}^{WKB} + \left(1 - \frac{1}{4k^2} \dot{k}^2 + \frac{1}{2k} \ddot{k} \right) \phi^{WKB} &= 0 \end{aligned} \quad (2.46)$$

exakt. Die Linearisierung in der Nähe des Umkehrpunktes ($k^2(x) \sim (x - x_{\pm})$) zeigt den Term auf, der zur Divergenz am Umkehrpunkt führt. Die korrigierte WKB-Gleichung eliminiert diesen Term und damit die Singularität.

$$\ddot{\phi}^{WKB} + \frac{\dot{k}}{k} \dot{\phi}^{WKB} + \left(1 - \frac{1}{4k^2} \dot{k}^2 + \frac{1}{2k} \ddot{k} + \frac{5}{36\alpha^2} \right) \phi^{WKB} = 0 \quad (2.47)$$

Mit dem Ansatz

$$\tilde{\phi}^{WKB}(\alpha) = \sqrt{\frac{\alpha}{k}} f(\alpha) \quad (2.48)$$

kann man (2.47) auf die allgemeine Bessel-Gleichung zurückführen. Die Lösung ist gegeben durch

$$\tilde{\phi}^{WKB}(\alpha) = \sqrt{\frac{\alpha}{k}} (a J_{1/3}(\alpha) + b J_{-1/3}(\alpha)) . \quad (2.49)$$

Mit dieser Lösung kann man nun die Anschlussbedingungen in der Nähe der Umkehrpunkte diskutieren. Sind die klassischen Umkehrpunkte x_{\pm} so ergibt sich letztlich:

$$\phi^{WKB}(x) = \frac{c}{2\sqrt{|k(x)|}} \exp \left[- \int_x^{x_-} |k(\xi)| d\xi \right], \quad x < x_- \quad (2.50)$$

$$\phi^{WKB}(x) = \frac{c}{2\sqrt{k(x)}} \cos \left[- \int_{x_-}^x k(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4} \right], \quad x_- < x < x_+ \quad (2.51)$$

$$\phi^{WKB}(x) = \frac{c}{2\sqrt{|k(x)|}} \exp \left[- \int_{x_+}^x |k(\xi)| d\xi \right], \quad x > x_+ \quad (2.52)$$

Durch die Diskussion der WKB-Näherung in der Nähe der Umkehrpunkte kann man eine Anpassung der WKB-Lösungen erreichen. Die Singularitäten an den Umkehrpunkten verschwinden jedoch nicht. Die Lösungen der korrigierten WKB-Gleichung (2.47), gegeben durch (2.49) zeigen die Singularität nicht.

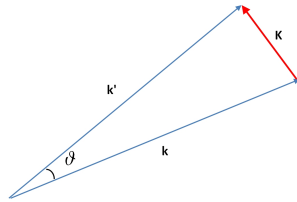
2.2.3 MB5: Resonanzstreuung

2.2.3.1 Das quantenmechanische Streuprobblem

Das dreidimensionale quantenmechanische Streuprobblem soll hier nicht vollständig abgehandelt werden. Es werden nur einige Formeln zusammengestellt, die das Verständnis des Beispiels erleichtern können.

Die Streuung wird als stationäres Problem behandelt. Es wird elastische Streuung angenommen, d.h. es werden keine inneren Teilchenumwandlungen zugelassen. Dies führt auf den in Abb. 2.4 dargestellten Zusammenhang der Wellenvektoren \mathbf{k} vor und \mathbf{k}' nach der Streuung.

Ziel: Bestimmung der Wahrscheinlichkeit das Teilchen nach der Streuung in einem bestimmtem Raumwinkel zu finden. Im quantenmechanischen Streuprobblem



$$k' = k, \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} K^2 &= 2k^2(1 - \cos \theta) \\ &= 2k \sin \theta / 2 \end{aligned}$$

Abb. 2.4 Wellenvektoren beim Streuprobblem

interessiert jetzt das asymptotische Verhalten. Es läuft eine ebene Welle ein. Die gestreute Welle ist eine vom Streuzentrum auslaufende Kugelwelle, die mit einem richtungsabhängigen Gewichtungsfaktor versehen ist (s. Abb. 2.5). Für das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion ergibt sich also

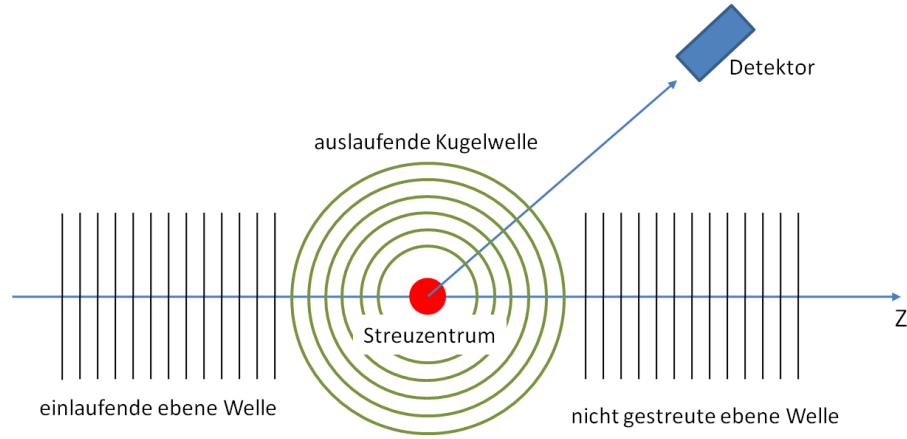


Abb. 2.5 Quantenmechanisches Streuprobem.

$$\begin{aligned}\psi_{as}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{r} \\ &= \psi_0 + \psi_s\end{aligned}\quad (2.54)$$

Die Funktion $f(\mathbf{k}')$ ist die **Streuamplitude**. Berechnet man die Stromdichten zu beiden Anteilen in der asymptotischen Wellenfunktion (2.54) erhält man

$$\mathbf{j}_0 = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}, \quad (2.55)$$

$$\mathbf{j}_s = \frac{j_0}{r^2} |f(\mathbf{k}')|^2 \mathbf{e}_r. \quad (2.56)$$

Damit ergibt sich

$$dN_s = d\mathbf{a} \cdot \mathbf{j}_s = |f(\mathbf{k}')|^2 j_0 d\Omega. \quad (2.57)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist somit durch die Streuamplitude gegeben.

$$\sigma(\Omega, E) = |f(\mathbf{k}')|^2. \quad (2.58)$$

Beim Streuprobem ist die Energie des einlaufenden Teilchens vorgegeben. Man kann also die Schrödinger-Gleichung wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\phi(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\phi(\mathbf{r}) \\ (\Delta + k^2)\phi(\mathbf{r}) &= \frac{2mV(r)}{\hbar^2}\phi(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (2.59)$$

Diese Gleichung muss durch (2.54) asymptotisch erfüllt werden. Es liegt kein Eigenwertproblem mehr vor. Man hat eine inhomogene Differentialgleichung zu lösen. Als Lösung von (2.59) findet man

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \int d^3\mathbf{r}' \frac{2mV(\mathbf{r}')}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi(\mathbf{r}') . \quad (2.60)$$

Die Auswertung von (2.60) wird dadurch kompliziert, dass die rechte Seite die gesuchte Funktion $\phi(\mathbf{r})$ selbst enthält.

In guter Näherung kann man annehmen, dass der Detektor sehr weit vom Streuzentrum entfernt ist. Dann können folgende Näherungen verwendet werden: $1/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx 1/r$ und $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{e}_r$. Damit erhält man aus (2.60) einen Ausdruck, den man mit der asymptotischen Form (2.54) vergleichen kann.

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{2mV(\mathbf{r}')}{4\pi\hbar^2} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}') \\ \psi_{as}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} \end{aligned} \quad (2.61)$$

Aus (2.61) kann man somit einen Ausdruck für die Streuamplitude ablesen

$$f(\mathbf{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} . \quad (2.62)$$

Im Kapitel 2.3.5 *Streuphasen* des Buches wurde der Begriff der Streuphase bereits eingeführt. Hier soll diese Größe noch einmal etwas allgemeiner betrachtet werden. Für die weiteren Betrachtungen wird ein kugelsymmetrisches Potential angenommen.

Der Hamiltonoperator eines freien Teilchens ist mit dem Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$, aber auch mit $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ vertauschbar. Die Wellenfunktion kann also einerseits als ebene Welle oder als Entwicklung nach freien Kugelwellen angegeben werden.

$$\phi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.63)$$

$$\phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.64)$$

(2.64) erfüllt folgende Eigenwertgleichungen

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) = \hbar^2 l(l+1) \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) , \quad (2.65)$$

$$\hat{L}_z \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) = \hbar m \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) , \quad (2.66)$$

$$\hat{H}_0 \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi_{k,lm}^0(\mathbf{r}) . \quad (2.67)$$

Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung liefert bei verschwindendem Potential $V(r) = 0$

$$u_l^0 = k \cdot r \cdot j_l(kr) \quad (2.68)$$

(2.68) hat folgendes asymptotisches Verhalten

$$\frac{u_l^{0(r)}(kr)}{kr} \rightarrow \frac{1}{kr} \sin(kr - l\frac{\pi}{2}) . \quad (2.69)$$

Liegt ein Streupotential vor, so kann man die Wirkung des Streupotentials auf die asymptotische Lösung durch eine **Streuphase** beschreiben.

$$\frac{u_l(kr)}{kr} \rightarrow \frac{1}{kr} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l) . \quad (2.70)$$

Die Streuphasen δ_l kann man durch die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung aus dem Streupotential als Funktion der Energie gewinnen $\delta_l = \delta_l(E)$. Die Streuamplitude lässt sich durch die Streuphasen ausdrücken.

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l . \quad (2.71)$$

Damit lässt sich auch der Gesamtwirkungsquerschnitt durch die Streuphasen ausdrücken. Die einzelnen Streukanäle zu verschiedenen l addieren sich hierbei, d.h.

$$\sigma_{ges} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad , \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l . \quad (2.72)$$

Weiterhin lässt sich das optische Theorem ableiten :

$$\sigma_{ges} = \frac{4\pi}{k} \Im f(\theta = 0) . \quad (2.73)$$

2.2.3.2 Resonanzstreuung - ein einfaches Beispiel

Entsprechend Abb. 2.6 ist das kugelsymmetrische Potential durch

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{R} \delta(r-R) \quad (2.74)$$

gegeben. Es handelt sich praktisch um eine Kugelschale. Die Streuphase zu $l=0$ kann man durch Auswertung der radialen Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\beta}{r} \delta(r-R) + k^2 \right] u(r) = 0 \quad (2.75)$$

berechnen. Für $r > R$ liegt praktisch schon asymptotisches Verhalten vor, so dass man ansetzen kann:

$$u_I = A \sin kr, \quad (2.76)$$

$$u_{II}(r) = \sin(kr + \delta_0). \quad (2.77)$$

Die Auswertung ergibt dann folgende Bestimmungsgleichung für die Streupase δ_0 (Streupase δ zu $l = 0$)

$$\tan(kR + \delta_0) = \frac{\tan kR}{1 + \beta / (kR) \tan kR}. \quad (2.78)$$

Für die Amplitude der Wellenfunktion für $r < R$ erhält man

$$|A|^2 = \frac{1 + \tan^2 kR}{\tan^2 kR + (1 + \beta / (kR) \tan kR)^2}. \quad (2.79)$$

Diskussion:

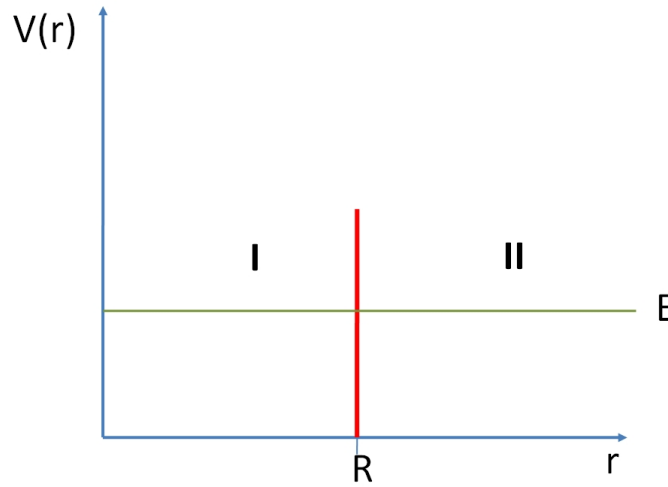


Abb. 2.6 Resonanzstreuung an einer Kugelschale

- Für $\beta = 0$ erhält man $\delta_0 = 0$, $|A|^2 = 1$, d.h. es liegt ein freies Teilchen vor. Für sehr großes β hat man ein „hard core“-Potential. Es ergibt sich die Streupase zum „hard core“ Potential δ_0^h zu $\delta_0^h = -kR$. Die Amplitude der Wellenfunktion für $r < R$ ist in diesem Falle natürlich $|A|^2 = 0$.
- Resonanz:
Bei vorgegebenem β lassen sich Energien, bzw Wellenvektoren k_r finden, für die der Nenner in (2.78) verschwindet, d.h.

$$1 + \beta / (k_r R) \tan k_r R = 0 ,$$

$$\tan k_r R = -\frac{k_r R}{\beta} . \quad (2.80)$$

Man erkennt, dass $\pi/2 \leq k_r R \leq \pi$ gelten muss, um die Gleichung zu erfüllen. An einer solchen Stelle gilt aber auch nach (2.78) $\tan(k_r R + \delta_0) = \infty$. Daraus folgt:

$$k_r R + \delta_0 = \frac{\pi}{2} \quad (2.81)$$

$$\delta_0 = -k_r R + \frac{\pi}{2} \quad (2.82)$$

$$\delta_0 - \delta_0^h = \frac{\pi}{2} . \quad (2.83)$$

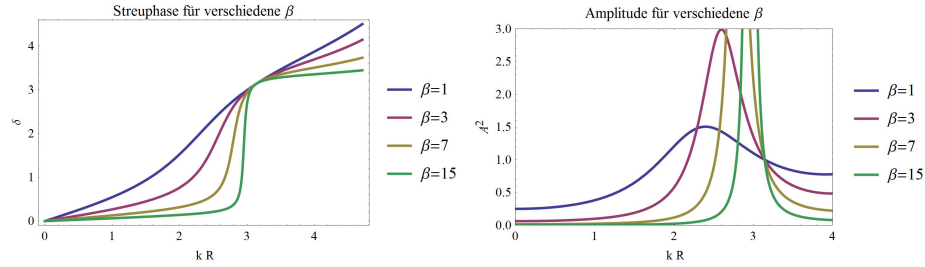


Abb. 2.7 Resonanzstreuung an der Kugelschale für $l = 0$. Link: Streuphasen, Rechts: Amplituden, für $\beta = 1, 3, 7, 15$. $k_r R$ verschiebt sich mit β zu größeren Werten: 2.02876, 2.45564, 2.76536, 2.94756

2.2.3.3 Streueigenschaften eines Potentials kurzer Reichweite

Gegeben sei ein Potential endlicher Reichweite. In diese Kategorie gehören insbesondere die sogenannten muffin-tin (MT) -Potentiale, eine Näherung, die zur Berechnung der elektronischen Eigenschaften von Festkörpern benutzt wird. In einer Kugel des Radius R_{MT} wird das Kristallpotential sphärisch gemittelt.

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(r) & r \leq R_{MT} \\ 0 & r \geq R_{MT} \end{cases} . \quad (2.84)$$

Man hat die radiale Schrödinger-Gleichung für eine bestimmte Energie zu lösen $2E = \kappa^2$

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r} + V(r) - \kappa^2 \right) R_l(\kappa, r) = 0 . \quad (2.85)$$

Innerhalb der MT-Kugel ist die Lösung durch die reguläre Lösung der radialen SG gegeben. Außerhalb hat man eine Linearkombination der regulären und irregulären

Lösung zu verschwindendem Potential anzusetzen.

$$R_l(\kappa, r) = \begin{cases} R_l^<(\kappa, r) & r \leq R_{MT} \\ R_l^>(\kappa, r) = \cos \delta_l j_l(\kappa r) - \sin \delta_l n_l(\kappa r) & r \geq R_{MT} \end{cases} \quad (2.86)$$

$R_l^>$ liefert das richtige asymptotische Verhalten. Am MT-Radius müssen die logarithmischen Ableitungen gleich sein. Das führt auf die Bestimmungsgleichung für die Streuphasen:

$$L_l(\kappa) = \frac{1}{R_l^<(\kappa, R_{MT})} \frac{dR_l^<(\kappa, r)}{dr} \Big|_{r=R_{MT}} \quad (2.87)$$

$$\tan \delta_l = \frac{L_l(\kappa) j_l(\kappa R_{MT}) - \kappa j_l'(\kappa R_{MT})}{L_l(\kappa) n_l(\kappa R_{MT}) - \kappa n_l'(\kappa R_{MT})} \quad (2.88)$$

Betrachtet man die harte Kugel mit dem Radius a , so ist die Formel einfach auszuwerten. Man erhält:

$$\tan \delta_l^h = \frac{j_l(\kappa R_{MT})}{n_l(\kappa R_{MT})} \quad (2.89)$$

wobei a der Radius der Kugel ist. Für $l = 0$ folgt das bekannte Ergebnis $\delta_0^h = -\kappa R_{MT}$.

2.2.4 MB7: Störungsrechnung

2.2.4.1 Störungsrechnung 2. Ordnung , Störungsrechnung bei Entartung

Im Kapitel 2.4.3 *Störungsrechnung* im Buch wird die Störungsrechnung nur in 1. Ordnung betrachtet. Die Ergebnisse für die 2. Ordnung werden hier angegeben. Eine Ableitung der Formeln entnimmt man der Quantentheorieliteratur.

Es sind die Eigenwerte und Eigenfunktionen zu einem Operator \hat{H} gesucht. Das Eigenwertspektrum E_n^0 und die Eigenfunktionen ϕ_n zum Operator \hat{H}_0 sind bekannt. \hat{H} gehe nun durch eine kleine Störung \hat{V} aus \hat{H}_0 hervor.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2.90)$$

Für die Störungsentwicklung wird aus dem Störoperator ein Parameter λ herausgezogen $\hat{V} = \lambda \hat{W}$. Die Störungsreihe wird später in Potenzen von λ verglichen. Es sind also Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi_m = E_m \psi_m \quad (2.91)$$

gesucht, wobei das Problem zu \hat{H}_0 vollständig gelöst vorliegt:

$$\hat{H}_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n \quad (2.92)$$

Die gesuchten Funktionen werden nun nach den Eigenfunktionen des ungestörten Problems entwickelt:

$$\psi_n = \sum_m c_{mn} \phi_m \quad (2.93)$$

Setzt man nun (2.93) in (2.91) ein, so erhält man, nach Multiplikation mit ϕ_m^* und Integration:

$$(E_n - E_m^0) c_{mn} = \lambda \sum_{m'} W_{mm'} c_{m'n} \quad (2.94)$$

$$W_{mm'} = (\phi_m, W \phi_{m'})$$

Das Problem ist somit auf ein unendliches algebraisches Gleichungssystem zurückgeführt.

Die Durchführung des Programms liefert für die Energieniveaus in den unterschiedlichen Ordnungen der Störungstheorie:

$$0 - \text{te} : E_n \approx E_n^0 \quad (2.95)$$

$$1 - \text{te} : E_n \approx E_n^0 + V_{nn} \quad (2.96)$$

$$2 - \text{te} : E_n \approx E_n^0 + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{(E_n^0 - E_m^0)} \quad (2.97)$$

Die Wellenfunktionen ergeben sich nach

$$0 - \text{te} : \psi_n \approx \phi_n \quad (2.98)$$

$$1 - \text{te} : \psi_n \approx \phi_n + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{(E_n^0 - E_m^0)} \cdot \quad (2.99)$$

Diskussion:

1. Die Korrektur 2. Ordnung zur Energie des Grundzustandes ist immer negativ, da in (2.97) $E_0^0 < E_n^0$ ist.
2. Für praktische Rechnungen wird die Energie zumeist in 2. Ordnung Störungstheorie und die Wellenfunktion in 1. Ordnung ausgewertet.
3. Die Reihe der sukzessiven Approximationen sollte konvergieren.

$$|V_{nm}| \ll |E_n^0 - E_m^0| \quad \forall \quad m \neq n, \quad (2.100)$$

d.h. die Nichtdiagonalelemente des Störoperators sollen klein gegen die Energiedifferenz der ungestörten Niveaus sein.

4. In der bisherigen Diskussion ist Entartung der Niveaus ausgeschlossen. Diese ist separat zu diskutieren.
5. Bei $\lambda \rightarrow 0$ sollte ein stetiges Übergehen in die ungestörten Lösungen gegeben sein.

Störungsrechnung bei Entartung

Die bisherigen Betrachtungen gelten nur, wenn die Energieniveaus nicht entartet

sind. Treten Entartungen auf, so werden in (2.97) und (2.99) Energienenner Null und die Störungsreihen divergieren. Da Linearkombinationen der Eigenfunktionen zu entarteten Niveaus ebenfalls Eigenfunktionen sind, geht man zu solchen Linearkombinationen über, bei denen die problematischen Störmatrixelemente verschwinden. Damit treten die divergierenden Summanden in der Reihe gar nicht erst auf. Die Durchführung dieses Programms führt auf folgende Formeln. Angenommen der Energieeigenwert E_n^0 sei f -fach entartet. Dann liefern der Ansatz:

$$\psi_n = \sum_{k=1}^f c_k \phi_{nk}, \quad (H^0 - E_n^0) \phi_{nk} = 0 \quad (2.101)$$

ein lineares Gleichungssystem zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten

$$\sum_{k=1}^f c_k (H_{mk} - E_n \delta_{mk}) = 0, \quad m = 1, \dots, f. \quad (2.102)$$

Das System hat nur dann nichttriviale Lösungen, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet.

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \dots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0 \quad (2.103)$$

Die Lösung von (2.103) liefert die Energieniveaus in 1. Ordnung Störungstheorie.

2.2.4.2 Harmonischer Oszillator

Bestimmte Störungen am harmonischen Oszillator können durch geeignete Umformungen der Schrödingergleichung exakt berücksichtigt werden.

a) Harmonische Störung

Die Schrödingergleichung weise ein Störpotential der Form $V_S(X) = \alpha m \omega x^2 / 2$ auf. Die Schrödingergleichung kann wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 + \alpha \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right\} \phi(x) &= E \phi(x), \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \left(\sqrt{1 + \alpha} \omega \right)^2 x^2 \right\} \phi(x) &= E \phi(x), \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \tilde{\omega}^2 x^2 \right\} \phi(x) &= E \phi(x). \end{aligned} \quad (2.104)$$

Es liegt also ein harmonischer Oszillator mit einer modifizierten Kreisfrequenz vor. Die Energieniveaus sind damit

$$E_n = \hbar\tilde{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\sqrt{1+\alpha}\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.105)$$

Die Aufsummation der Störungsreihe in unendlicher Ordnung ergibt das exakte Ergebnis.

b) Lineare Störung

Das Störpotential sei jetzt $V_S(x) = \alpha mx$. Es ergibt sich nun unter Verwendung einer quadratischen Ergänzung:

$$\begin{aligned} & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 + \alpha m \omega^2 x \right\} \phi(x) = E \phi(x) , \\ & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 (x^2 + 2\alpha x + \alpha^2 - \alpha^2) \right\} \phi(x) = E \phi(x) , \\ & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} (x + \alpha)^2 - \frac{m}{2} \omega^2 \alpha^2 \right\} \phi(x) = E \phi(x) , \\ & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} (x + \alpha)^2 \right\} \phi(x) = \left(E + \frac{m}{2} \omega^2 \alpha^2 \right) \phi(x) . \end{aligned} \quad (2.106)$$

Eine Koordinatentransformation $\xi = x + \alpha$ und die Einführung der Energie $E' = E + m\omega^2\alpha^2/2$ überführt die Gleichung (2.106) in die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators. Somit ergeben sich die gesuchten Eigenwerte bei linearer Störung zu:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{m}{2} \omega^2 \alpha^2 . \quad (2.107)$$

Hier bekommt man in 2. Ordnung Störungstheorie das exakte Ergebnis, d.h. die höheren Ordnungen verschwinden identisch.

2.2.4.3 Stark-Effekt

Es wird das Wasserstoffatom in einem homogenen äußeren elektrischen Feld betrachtet. Das Feld sei in z-Richtung gerichtet. Der Störterm ist dann die potentielle Energie des Elektrons in diesem Feld:

$$V_S(z) = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} \quad (2.108)$$

Betrachtet man die Niveaus mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ im Wasserstoffatom, so liegt, ohne Berücksichtigung des Spins, eine vierfache Entartung vor. ($1 \times 2s, 3 \times 2p$). Das äußere Feld verringert die Symmetrie. Es liegt keine Kugelsymmetrie, sondern nur noch Zylindersymmetrie vor. Die vierfache Entartung wird durch die Zylindersymmetrie aufgehoben. Die Entartung zwischen dem $2s$ und dem $2p_z$ Orbital wird aufgehoben. Die Energien der Orbitale $2p_x$ und $2p_y$ bleiben entartet.

2.2.5 MB9: Kugelflächenfunktionen und Orbitale

Die Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen wurden im Buch in Kapitel 4.2.4 *Eigenfunktionen und Eigenwerte von \hat{L}^2* diskutiert. Neben den komplexen Kugelflächenfunktionen spielen auch die reellen Linearkombinationen, die im Notebook auch verwendet werden, eine große Rolle. Diese sind über

$$S_l^m = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_l^m + (-1)^{-m} Y_l^{-m}) & , \quad m > 0 \\ Y_l^0 & , \quad m = 0 \\ \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_l^{-m} - (-1)^m Y_l^m) & , \quad m < 0 \end{cases} \quad (2.109)$$

definiert.

2.2.6 MB12: Die Numerov-Methode

Wir gehen von der radialen Schrödinger-Gleichung in atomaren Einheiten aus.

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) + \varepsilon \right) u(r) = 0 \quad , \quad \varepsilon = 2E \quad (2.110)$$

Da es bei der Numerov-Methode auf die Entwicklung eines numerischen Verfahrens ankommt, d.h. eine Diskretisierung vorgenommen werden muss (Differentialquotient \rightarrow Differenzenquotient), schreibt man die Ableitung zweckmäßigerweise separat

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) = \left(V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - \varepsilon \right) u(r) . \quad (2.111)$$

Um die oben genannten Probleme zu umgehen, wird ein **logarithmisches Netz** verwendet. Folgende Transformation wird ausgeführt:

$$x = \ln r \rightarrow r = e^x \quad (2.112)$$

$$y = u e^{-x/2} = \sqrt{r} R(r) \rightarrow u(r) = y(x) e^{x/2} . \quad (2.113)$$

Die Durchführung der Substitution führt auf die folgende Differentialgleichung:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + (V - \varepsilon) e^{2x} \right] y . \quad (2.114)$$

Zur Diskretisierung der zweiten Ableitung führen wir eine Taylorentwicklung um den Punkt $x_n = x_0 + n \cdot h$ auf dem äquidistanten Netz für x aus. Wir betrachten dabei die zu x_n benachbarten Punkte $n \pm 1$.

$$y_{n\pm 1} = y_n \pm hy'_n + \frac{h^2}{2}y''_n \pm \frac{h^3}{6}y'''_n + \frac{h^4}{24}y^{(4)}_n \quad (2.115)$$

Damit erhält man sofort :

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y_n + h^2y''_n + \frac{h^4}{12}y^{(4)}_n + \dots \quad (2.116)$$

Bildet man die zweite Ableitung und vernachlässigt höhere Terme und ersetzt damit die 4. Ableitung in (2.115) erhält man :

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y_n + h^2y''_n + \frac{h^2}{12} [y''_{n+1} + y''_{n-1} - 2y''_n] . \quad (2.117)$$

Die Differentialgleichung (2.114) hat die Form $y'' = f(x)y + g(x)$. Ersetzt man nun die zweiten Ableitungen in (2.117) durch $y''_n = f_n y_n + g_n$ erhält man letztlich:

$$y_{n+1} = \left[y_n \left(2 + \frac{10}{12} h^2 f_n \right) - y_{n-1} \left(1 - \frac{h^2}{12} f_{n-1} \right) + \frac{h^2}{12} (g_{n+1} + 10g_n + g_{n-1}) \right] \frac{1}{1 - \frac{h^2}{12} f_{n+1}} . \quad (2.118)$$

Man erhält eine Rekursionsformel, in der y_0, y_1 als Startwerte benötigt werden. Im Falle der radialen Schrödinger-Gleichung ist $g \equiv 0$ und die Gleichung vereinfacht sich entsprechend.

Die absoluten Werte von y_0, y_1 sind auf Grund der Normierbarkeit der Wellenfunktion nicht entscheidend, aber das Verhältnis y_1/y_0 muss so genau wie möglich festgelegt werden. Da bei $r \rightarrow 0$, $x \rightarrow \infty$ kann man z.B. $x_0 = 10$ wählen. Kann man das Zentralpotential in der Form schreiben

$$V(r) = -\frac{2Z}{r} + \sum_{s=0}^{\infty} A_s r^s \quad (2.119)$$

und verwendet für kleine r den Ansatz für $u(r)$

$$u = r^{l+1} \sum_{s=0}^{\infty} a_s r^s \quad (2.120)$$

kann man das Verhältnis y_1/y_0 bestimmen. Man erhält für die Entwicklungskoeffizienten der Wellenfunktion:

$$\frac{a_1}{a_0} = -\frac{Z}{(l+1)} \quad (2.121)$$

$$\frac{a_2}{a_0} = \frac{1}{(4l+6)} \left[\frac{2Z^2}{l+1} + A_0 - \varepsilon \right] \quad (2.122)$$

Damit letztlich

$$\frac{y_1}{y_0} = e^{-h/2} \frac{e^{h(l+1)} + (a_1/a_0)e^{x_0+h(l+2)}}{1 + (a_1/a_0)e^{x_0}} \quad (2.123)$$

Für kleine x_0 ($x_0 \rightarrow -\infty$) wird der Ausdruck besonders einfach.

$$\frac{y_1}{y_0} = e^{h(l+1/2)} \quad (2.124)$$

2.3 Zusätzliche Notebooks - MZ#

2.3.1 MZ1: Gebundene Zustände im δ -Potential

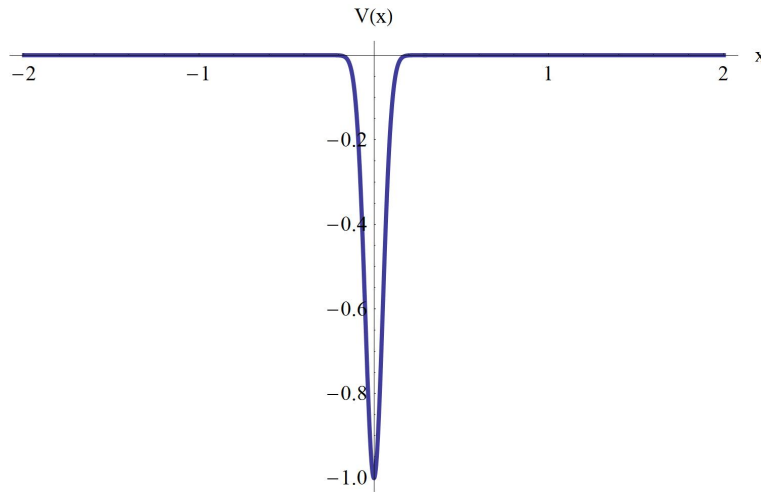


Abb. 2.8 Das δ -Potential (Bereich I ($x < 0$), Bereich II ($x > 0$)).

Ein besonders einfaches und vollständig analytisch lösbares Beispiel ist das δ -Potential. Das Potential wird in der Form

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\beta\delta(x) \quad , \quad \beta > 0 \quad (2.125)$$

angesetzt. Damit ergibt sich für die stationäre SG

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \beta\delta(x) - \kappa^2 \right] \phi_n(x) = 0 \quad , \quad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad . \quad (2.126)$$

Auf Grund des Auftretens der Distribution $\delta(x)$ in der SG müssen die Randbedingungen noch einmal untersucht werden. Die Wellenfunktion muss an der Stelle

$x = 0$ stetig sein. Um das Verhalten der Ableitung zu untersuchen, wird (2.126) integriert. Man erhält:

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \left[\frac{d^2}{dx^2} + \beta \delta(x) - \kappa^2 \right] \phi_n(x) = 0 \quad . \quad (2.127)$$

Das erste Integral liefert die Ableitungen an $\pm\varepsilon$. Das zweite Integral liefert die Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$. Das dritte Integral liefert einen endlichen Beitrag $\propto \varepsilon$. Nun wird der Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ ausgeführt. Das endgültige Resultat ist die Randbedingung für die Ableitung am δ -Potential

$$\frac{d}{dx} \phi_I(x)|_{x=-0} - \frac{d}{dx} \phi_{II}(x)|_{x=+0} = \beta \phi(0) \quad (2.128)$$

Die Wellenfunktion muss entsprechend (2.126) im Gebiet I und II exponentiell abklingen. Dies führt zu folgendem Ansatz, in dem die Stetigkeit an $x = 0$ schon berücksichtigt ist

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= c e^{\kappa x}, \\ \phi_{II}(x) &= c e^{-\kappa x}. \end{aligned}$$

Die Auswertung von (2.128) liefert nun

$$\begin{aligned} c\kappa + c\kappa &= \beta c \\ 2\kappa &= \beta \\ E &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\beta}{2} \right)^2 \end{aligned}$$

Die Konstante im Ansatz der Wellenfunktion wird aus der Normierungsbedingung bestimmt. Insgesamt erhält man als Lösung für das δ -Potential

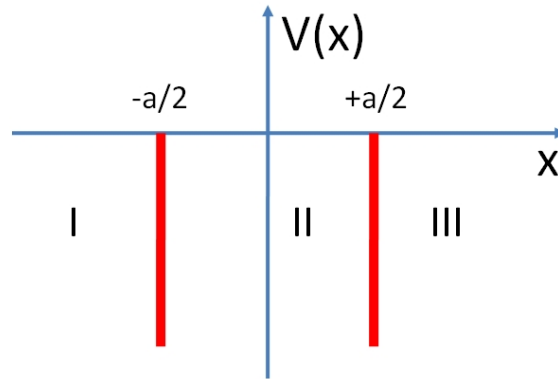
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\beta}{2} \right)^2 \quad (2.129)$$

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{\beta}{2}} e^{-\beta|x|/2} \quad (2.130)$$

Das δ -Potential hat nur einen gebundenen Zustand. Die Wellenfunktion hat bei $x = 0$ einen Knick.

2.3.1.1 Das Doppel- δ -Potential.

Die einfachste Doppelmulde ist das Doppel- δ -Potential. Entsprechend Abb. (2.9) wird folgendes Potential betrachtet

Abb. 2.9 Doppel- δ -Potential

$$V(X) = -\frac{\hbar^2}{2m}\beta \left[\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] .$$

Damit erhält die stationäre SG die folgende Gestalt

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \beta \left[\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] - \kappa^2 \right\} \phi(x) = 0 . \quad (2.131)$$

Die Wellenfunktion wird gebietsweise wie folgt angesetzt:

$$\phi_I(x) = ae^{\kappa x} \quad (2.132)$$

$$\phi_{II}(x) = b_1 e^{\kappa x} + b_2 e^{-\kappa x} \quad (2.133)$$

$$\phi_{III}(x) = ce^{-\kappa x} \quad (2.134)$$

Für die symmetrischen Lösungen gilt $a = c, b_1 = b_2$. Für die antisymmetrischen Lösungen gilt entsprechend $a = -c, b_1 = -b_2$. Somit hat man in beiden Fällen nur jeweils zwei unbekannte Koeffizienten zu bestimmen:

- **symmetrische Lösungen :**

Aus den Randbedingungen an der Stelle $x = -a/2$ leitet man die folgenden Gleichungen ab

$$a = b(e^{\kappa a} + 1) ,$$

$$a - b(1 - e^{\kappa a}) = \frac{\beta}{\kappa} a .$$

Mit der ersten Gleichung läßt sich a in der zweiten Gleichung eliminieren und dann b herauskürzen. Als Eigenwertbedingung bleibt dann übrig

$$\frac{2\kappa}{\beta} = 1 + e^{-\kappa a} \quad . \quad (2.135)$$

• **antisymmetrische Lösungen :**

Aus den Randbedingungen an der Stelle $x = -a/2$ leitet man für den antisymmetrischen Fall die folgenden Gleichungen ab

$$\begin{aligned} a &= b(e^{\kappa a} - 1) \quad , \\ a + b(1 + e^{\kappa a}) &= \frac{\beta}{\kappa} a \quad . \end{aligned}$$

Als Eigenwertbedingung erhält man

$$\frac{2\kappa}{\beta} = 1 - e^{-\kappa a} \quad . \quad (2.136)$$

2.3.1.2 Diskussion

Man erhält also insgesamt als transzendente Bestimmungsgleichungen für die Energieniveaus

$$\frac{2\kappa}{\beta} = \begin{cases} 1 + e^{-\kappa a} & \text{symmetrische Lösungen} \\ 1 - e^{-\kappa a} & \text{antisymmetrische Lösungen} \end{cases} \quad (2.137)$$

Man kann die Lösungen wieder graphisch diskutieren. In Abb. (2.10) sind die linke Seite sowie die rechten Seiten der Gleichungen (2.137) graphisch dargestellt. Die Schnittpunkte geben die Energieniveaus an. Für wachsenden Abstand fallen die e-Funktionen stärker ab und die Energieniveaus liegen näher beieinander. Man sieht auch, daß die Stärke des δ -Potentials den Anstieg der Geraden bestimmt. Ist dieser größer als der Anstieg von $1 - \exp(-\kappa a)$ an $x = 0$, gibt es nur einen gebundenen Zustand.

$$\frac{d}{d\kappa}(1 - e^{-\kappa a})|_{x=0} = \frac{2}{\beta} \quad \rightarrow \quad a = \frac{2}{\beta}$$

Ist der Abstand der Potentiale also kleiner als $2/\beta$, gibt es nur einen gebundenen Zustand. Die Abhängigkeit der Lage der Energieniveaus vom Abstand der δ -Potentiale ist in Abb. (2.11) gezeigt.

2.3.2 MZ2: Potentialtopf mit δ -Störung

Vorgegeben ist der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden und der Breite a als ungestörtes Problem. Das gestörte Potential ist in Abb. 2.12 dargestellt und durch

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > a/2 \\ \hbar^2/2m \beta \delta(x) & |x| < a/2 \end{cases} \quad (2.138)$$

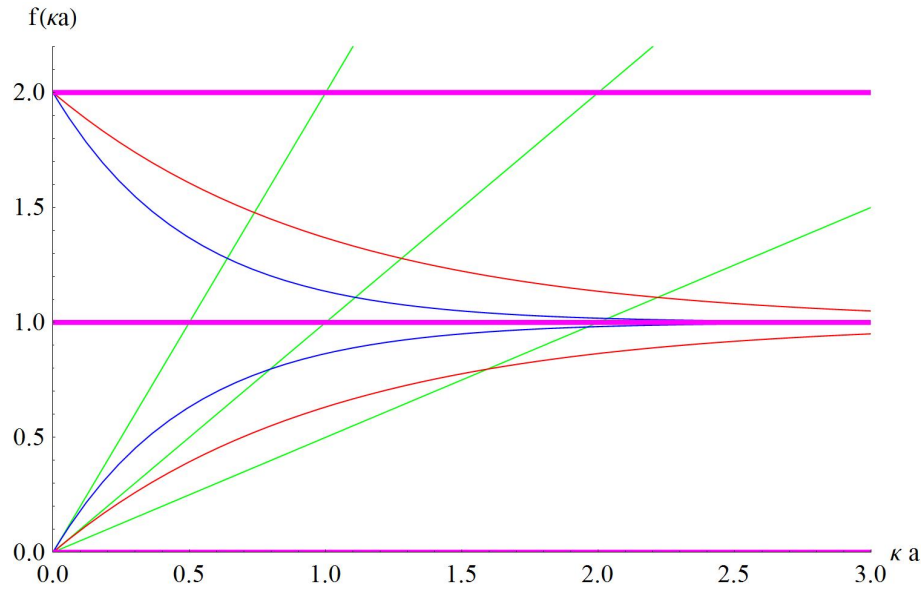


Abb. 2.10 Lösen der Eigenwertbedingung: $f(\kappa a)$ (blau), $f(c\kappa a)$, $c < 1$ (braun), $2\kappa a/(\beta a)$ für verschiedene β (grün)

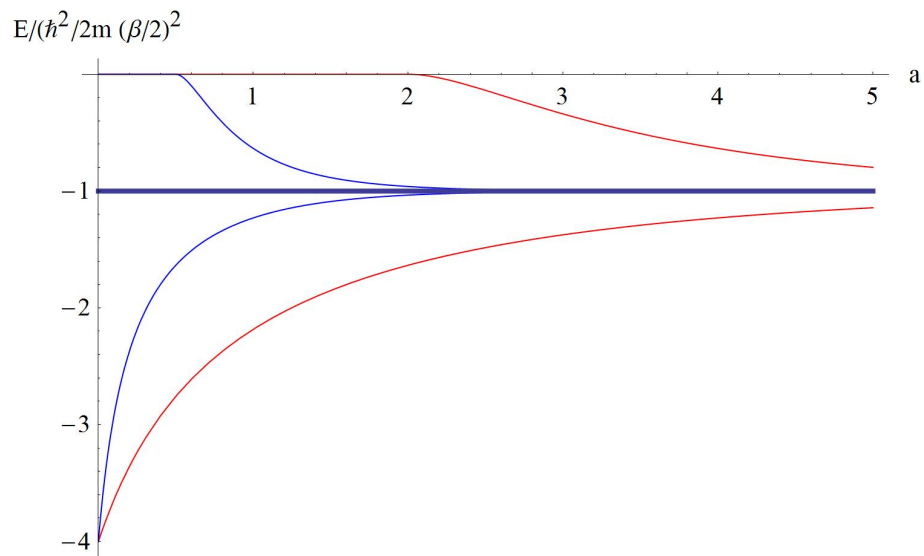


Abb. 2.11 Abhängigkeit des symmetrischen und antisymmetrischen Zustandes vom Abstand a , β_1 (blau), β_2 (braun), $\beta_1 > \beta_2$

gegeben. Das Potential ist symmetrisch und hat deshalb symmetrische und antisymmetrische Lösungen. Man kann die Lösungen des Problems **exakt** berechnen und störungstheoretisch behandeln.

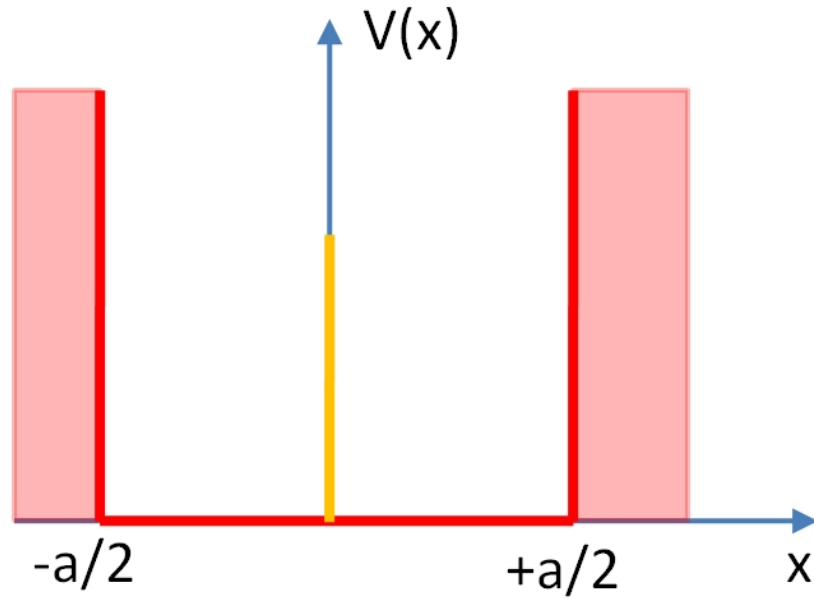


Abb. 2.12 Potentialtopf mit δ -Störung

2.3.2.1 Exakte Lösung

Auf Grund der Symmetrie der Lösungen ergibt sich sofort, dass die antisymmetrischen Lösungen des ungestörten Problems nicht gestört werden. An der Position der δ -Störung liegt ein Knoten der ungestörten Wellenfunktion vor, d.h. dort ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons Null. Es wird durch die Störung nicht beeinflusst.

Für die Wellenfunktion macht man die Ansätze:

$$\phi_I(x) = a \sin k(x + a/2) \quad x < 0, \quad (2.139)$$

$$\phi_{II}(x) = b \sin k(x - a/2) \quad x > 0. \quad (2.140)$$

Die Diskussion der Randbedingungen ergibt dann für die symmetrischen Eigenwerte die folgende Eigenwertbedingung:

$$\tan \frac{ka}{2} = -\frac{2k}{\beta} \quad (2.141)$$

Aus (2.141) kann man die Energieniveaus und nachfolgend die Normierung der Wellenfunktion bestimmen. Abb. 2.13 zeigt die exakten Lösungen zu $n = 0$ und $n = 2$, d.h. die beiden energetisch niedrigsten symmetrischen Zustände im Potential (2.138).

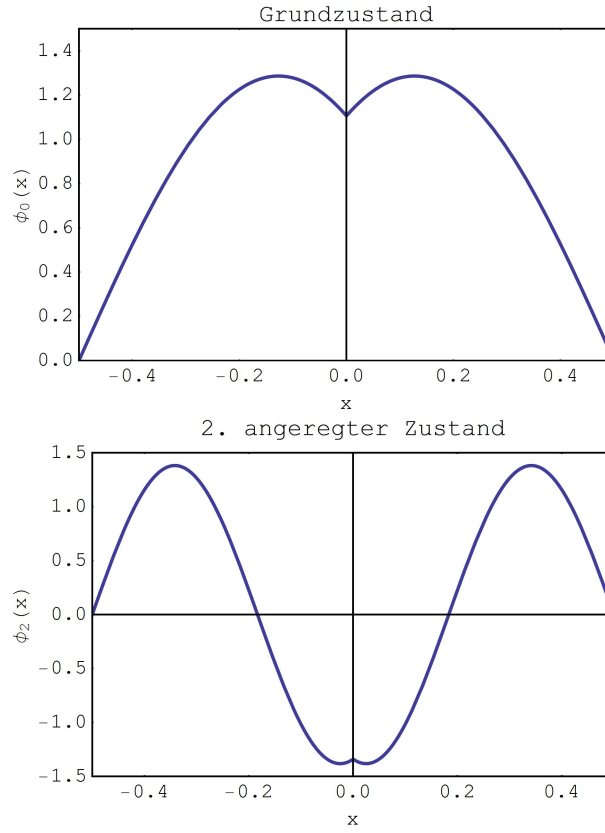


Abb. 2.13 Symmetrische Zustände zu $n = 0, 2$ im Potential (2.12) (exakte Lösung).

2.3.2.2 Störungstheoretische Auswertung

Die Lösung des ungestörten Problems ist gegeben durch

$$E_n^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 (n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.142)$$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n+1) \frac{\pi}{2} (2\xi + 1) \quad \xi = \frac{x}{a} \quad (2.143)$$

Für die Störmatrixelemente V_{nm} ergibt sich:

$$V_{nm} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a} \beta \sin(m+1) \frac{\pi}{2} \sin(n+1) \frac{\pi}{2} \quad m, n = 0, 1, \dots \quad (2.144)$$

$$V_{2k,2l} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a} \beta (-1)^{k+l} \quad k, l = 0, 1, \dots \quad (2.145)$$

In der Struktur der Störmatrixelemente drückt sich aus, dass nur die symmetrischen Zustände mit $n = 0, 2, 4, \dots$ gestört werden. In 2. Ordnung Störungstheorie erhält man für den Grundzustand mit (2.142), (2.143) und (2.145)

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a} \beta + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2}{\pi} \right)^2 \beta^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - (2k+1)^2} \quad (2.146)$$

Für die Wellenfunktion des Grundzustandes erhält man:

$$\psi_0 = \phi_0 + \frac{2\beta}{a} \left(\frac{2}{\pi} \right)^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \phi_{2k}}{1 - (2k+1)^2} \quad (2.147)$$

Für eine numerische Auswertung geht man in (2.146) und (2.147) zu atomaren Einheiten über und verwendet $\beta = 5$ a.u. und $a = 1$ a.u. Abb. 2.14 zeigt den Vergleich für die Grundzustandswellenfunktion. Die exakte Energie ergibt sich zu

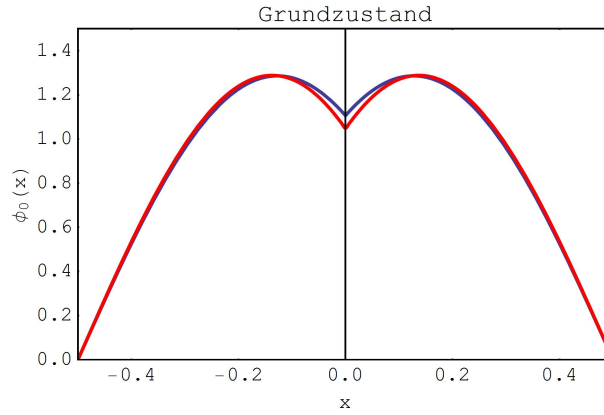


Abb. 2.14 Exakte (blau) und störungstheoretisch (rot) berechnete Grundzustandswellenfunktion

$E_0 = 8.87364$ a.u. Bei der störungstheoretischen Behandlung ergibt sich in 1. Ordnung $E_0 = 9.9348$ a.u. Dies bedeutet einen Fehler von ca. 12 %. Die 2. Ordnung Störungstheorie liefert $E_0 = 8.6683$ a.u. Dies senkt den Fehler auf 2%.

Sachverzeichnis

- δ -Potential
 - Doppel- δ -Potential, 27
 - Gebundene Zustände, 25
- Ableitung
 - logarithmische, 19
- Airy-Funktionen, 5
- differentieller Wirkungsquerschnitt, 14
- effektive Masse, 9
- Effektivmassennäherung, 9
- Gesamtwirkungsquerschnitt, 16
- Halbleitermikrostruktur, 9
- harmonischer Oszillator, 21
- Langer-Methode, 11
- logarithmische Ableitung, 19
- Muffin tin-Potential, 18
- Muffin-tin-Radius, 18
- Numerov-Methode, 23
- optisches Theorem, 16
- Potential
 - hard core, 17
 - kugelsymmetrisch, 15
- Resonanzstreuung, 16
- Störungsrechnung
 - 2. Ordnung, 20
 - bei Entartung, 21
 - zeitunabhängig, 19
- Stark-Effek, 22
- Streuamplitude, 14, 15
- Streuphase, 15, 16
- Stromdichte, 14
- Topf mit δ -Störung, 29
 - exakte Lösung, 30
 - Störungstheorie, 31
- Transfermatrix, 6
- Transfermatrixmethode
 - Effektive Massen, 9
 - Gebundene Zustände, 7
 - Periodisches Potential, 9
 - Streuzustände, 8
- WKB-Methode, 10

Literaturverzeichnis

1. B. Jonsson. Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 26:2025–2035, 1990.
2. D.C. Hutchings. Transfer matrix approach to the analysis of an arbitrary quantum well structure in an electric field. *Applied Physics Letters*, 55:1082–84, 1989.
3. W. Hergert. Transfermatrixmethoden zur Lösung quasi-eindimensionaler quantenmechanischer Probleme. *Wiss. Zeitschrift Univ. Halle*, XXXIX:89–99, 1990.
4. Wolfgang Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik, Band 5 Quantenmechanik, Teil 2: Methoden und Anwendungen*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1993.
5. R. E.Langer. On the connection formulas and the solutions of the wave equation. *Phys. Rev.*, 51:669–676, 1937.