

4. Eindimensionale Probleme

(24)

Betrachte einfache QM Probleme in einer Dimension
zeitunabh. S-Glg.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

mit Normierung $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 = 1$

Betrachte auch Potentiale mit Sprüngen, bzw.
allg. $V(x)$ und $V'(x)$ sei unstetig möglich

Wie verhält sich $\Psi(x)$ an Unstetigstellen von $V(x)$?

$$\text{Da } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = + \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) \Psi(x) - E \Psi(x))$$

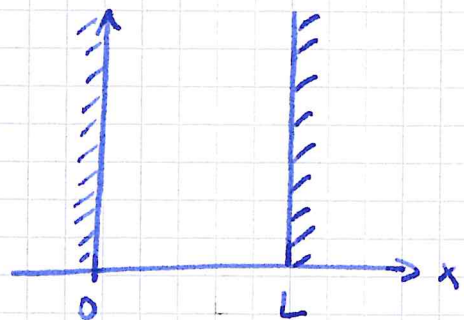
muß $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ stetig sein,

denn $\Psi''(x)$ existiert, aber $\Psi''(x)$ kann unstetig sein.
falls $V(x)$ unstetig

4.1 Unendlicher Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

beschreibt Kasten mit
undurchdringlichen Wänden



außerhalb des Kastens $\Psi(x) = 0$, $x \leq 0$ oder $x \geq L$

im Innern: zeitunabh. S-Glg.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = E \Psi(x) \quad \text{mit } E \text{ reell, positiv}$$

→ Wellenglg. mit Randbedingung $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$,
da Ψ stetig

Schreibe $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \psi''(x) = -k^2 \psi(x)$

(25)

Allg. Lösg $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

Ans $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$

Ans $\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$
mit $n = 1, 2, 3, \dots$

$\Rightarrow \psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$

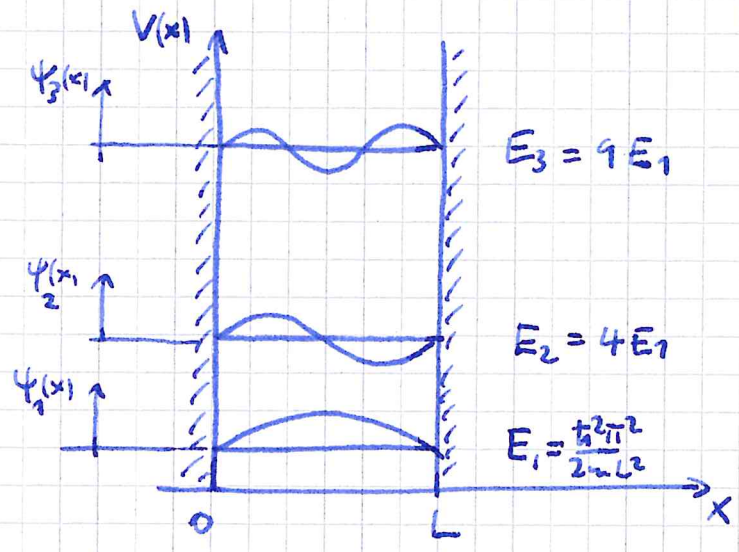
$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2$

Normierung
 $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

nur diskrete Energien sind erlaubt!
→ Quantisierung der Energie

Nullpunktsenergie $E_1 > 0$

Eigenfunktionen und Eigenwerte E_n : graphische Darstellung



Eigenschaften von $\Psi_n(x)$ (hier für unendl. Potentialtopf, werden aber sehen gelten allg.)

$\Psi_n(x)$ sind orthogonal im Sinne des Skalarprodukts

$$\int_0^L dx \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) = \delta_{nm}$$

$\Psi_n(x)$ sind vollständiges Funktionensystem.

d.h. jedes $\phi(x)$ (bel. Wellenfkt. mit $\phi(x)=0$ für $x \leq 0$ oder $x \geq L$)

läßt sich in $\Psi_n(x)$ entwickeln mit

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x) \quad (*)$$

$$\text{und } c_m = \int_0^L dx \Psi_m^*(x) \phi(x) \quad (\text{folgt aus } (*) \text{ durch Multiplikation mit } \Psi_m^*(x) \text{ Integration + Orthogonalität})$$

(Bemerkung: für den unendl. Potentialtopf ist dies identisch zu Fourier Trafo/Reihe)

Verallgemeinerung auf 3-dim. unendl. Potentialtopf

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, 0 \leq z \leq L \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\Psi_{\vec{n}} = \sqrt{\frac{2^3}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

(n_x, n_y, n_z) mit n_i = 1, 2, 3, ...

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

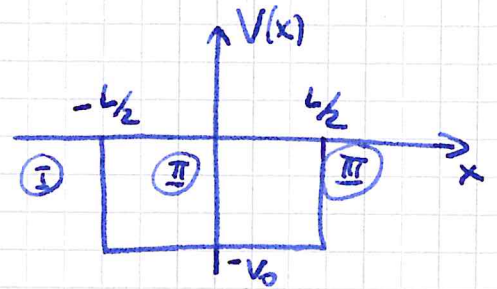
Grundzustand $n_x = n_y = n_z = 1 \quad \rightarrow \quad = 1$

1. angeregter Zustand $n_x=2, n_y=n_z=1$ oder $n_y=2, n_x=n_z=1$ oder $n_z=2, n_x=n_y=1$ \rightarrow 3-fach entartet $= 3$

4.2 Endlicher Potentialtopf

(27)

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| \leq \frac{L}{2} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$



Schreibe $V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$

Vom unendlichen Potentialtopf erwarten wir,
dass Grundzustand eine gerade Wellenfunktion ist
(Krümmung/Knoten $\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ kosten kinetische Energie)

Ansatz für gerade Lösungen für $E < 0$ (gebundene Zustände)

$$\psi(x) = \begin{cases} N_a e^{kx}, & x < -\frac{L}{2} & \text{I} \\ N_i \cos k'x, & |x| \leq \frac{L}{2} & \text{II} \\ N_a e^{-kx}, & x > \frac{L}{2} & \text{III} \end{cases}$$

Einsetzen in Schrödinger-Glg. gibt für

Bereich **I** und **III**: $E \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)$

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (k \text{ gibt Energie})$$

Bereich **II**: $E \psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \right) \psi(x)$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

$$k'^2 = \alpha^2 - k^2 \quad \text{oder} \quad k^2 = \alpha^2 - k'^2$$

Bemerkung zu Ansatz:

(29)

Für stückweise konstante Potentiale ist S-Glg. von der Form

$$(E - V) \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)$$

hier in $\textcircled{\text{I}}$ und $\textcircled{\text{III}}$ $V=0$ und in $\textcircled{\text{II}}$ $V=-V_0$

d.h. $\psi'' \sim \psi$

Lösungen sind $\psi(x) \sim e^{\pm ax}$ für $E - V < 0$

oder $\psi(x) \sim e^{\pm ibx}$ für $E - V > 0$

Ansatz oben nimmt nur normierbaren Teil

bzw. in $\textcircled{\text{II}}$ Kombination von $e^{\pm ibx} = \cos bx \pm i \sin bx$
mit entsprechender Symmetrie (gerade/ungerade,
cos / sin)

Aus Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = \pm \frac{L}{2}$ folgt
 ψ und ψ'

$$\frac{\psi'(\frac{L}{2}^-)}{\psi(\frac{L}{2}^-)} = \frac{-k' \sin \frac{k'L}{2}}{\cos \frac{k'L}{2}} = \frac{-k e^{-\frac{kL}{2}}}{e^{-\frac{kL}{2}}} = \frac{\psi'(\frac{L}{2}^+)}{\psi(\frac{L}{2}^+)}$$

logarithmische Ableitung
von $\frac{L}{2} - \epsilon$ kommt
(bei ψ'/ψ fällt Normierung raus!)

$$\Rightarrow k' \tan \frac{k'L}{2} = k$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\tan \frac{k'L}{2} = \frac{k}{k'} = \frac{\sqrt{(\frac{\hbar^2 k^2}{2m})^2 - (\frac{\hbar^2 k'^2}{2m})^2}}{k' \frac{L}{2}}} \quad (*)$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x = -\frac{L}{2}$ führt
aus Symmetriegründen zu gleichen Bedingungen

Ungerade Lösungen für $E < 0$

(29)

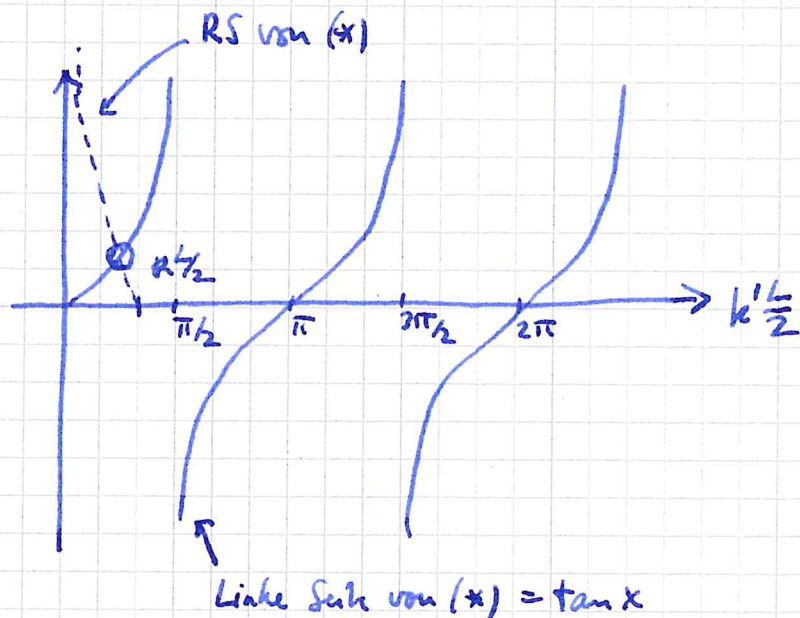
$$\Psi(x) = \begin{cases} N_a e^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ N_i \sin k'x, & |x| \leq \frac{L}{2} \\ N_a e^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

Aus Stetigkeit von Ψ und Ψ' folgt

$$k' \cot(k' \frac{L}{2}) = -k$$

$$\Rightarrow \boxed{\cot k' \frac{L}{2} = -\frac{\sqrt{(R \frac{L}{2})^2 - (k' \frac{L}{2})^2}}{k' \frac{L}{2}}}$$

Graphische Bestimmung von k' für gerade Lösungen



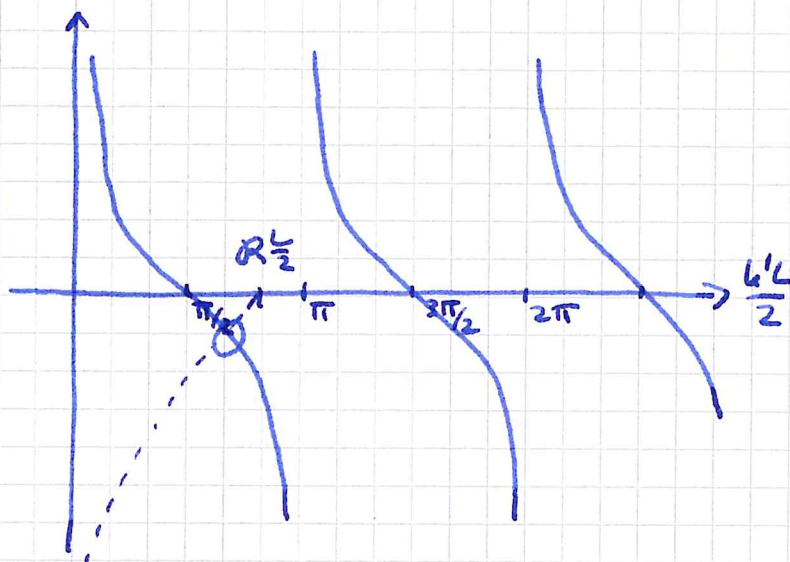
\Rightarrow Es gibt mindestens eine Lösung (einen gebundenen Zustand) \otimes für beliebig schwaches V_0 (in einer Dimension)

Für $R \frac{L}{2} \geq n \cdot \pi$ $n = 1, 2, 3, \dots$

gibt es dann $n+1$ gebundene Zustände

... für ungerade Lösungen

30



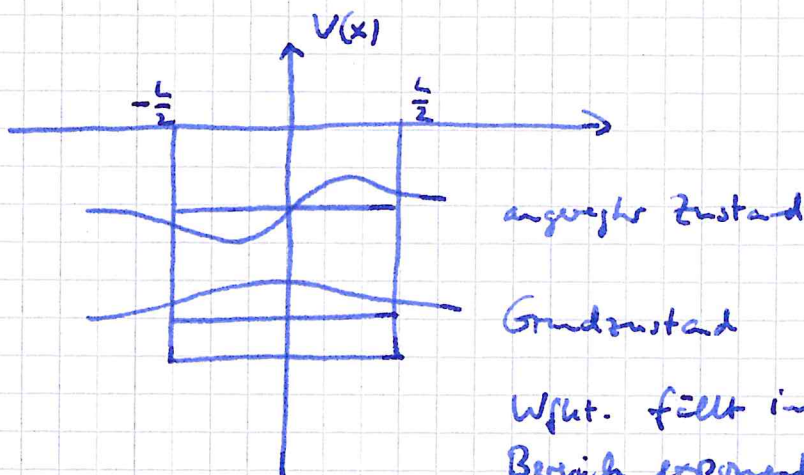
⇒ Es gibt nur eine ungerade Lösung, wenn $R\frac{L}{2} \geq \frac{\pi}{2}$
d.h. nur ab einer gewissen Stärke des Potentials

Konstanten N_a und N_i werden aus Normierung
und Stetigkeit von $\psi(\frac{L}{2}^-) = \psi(\frac{L}{2}^+)$ bestimmt
(Stetigkeit von ψ' ist dann vorherige Bedingung von $\frac{\psi'}{4}$ geg.)

Nach graphischer Bestimmung von k' folgt die Energie

$$E = -\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} (R^2 - k^2)$$

Graphische Darstellung (hier für $R\frac{L}{2} \in [\frac{\pi}{2}, \pi)$)



Wfkt. fällt im kl. verbotenen
Bereich exponentiell ab $\psi \sim e^{-kx}$
(allg. Verhalten von gebundenen Zuständen)

wie schon für den unendlichen Potentialtopf
gesehen, hat jeder angeregte Zustand einen Knoten mehr

(37)

→ Krümmung kostet
mehr kin. Energie

Grenzfall unendl. Potentialtopf

L fest, aber $V_0 \rightarrow \infty$ d.h. $R \frac{L}{2} \rightarrow \infty$

⇒ gerade Lösungen genügen $k \frac{L}{2} = \frac{(2n+1)\pi}{2}$, $n=0, 2, 4, \dots$
ungerade $n\pi$, $n=1, 3, \dots$

$$\Rightarrow E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

||
 $\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ ✓

$n=1, 2, 3, \dots$

4.3 δ -Potential

32

$$V(x) = -g \delta(x) \quad g > 0$$

Ausatz für gebundenen Zustand

$$\psi(x) = N e^{-k|x|}$$

vgl. endl. Potentialtopf
ohne Bereich $\textcircled{\text{II}}$

Schrödingergl.

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - g \delta(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Integration von $-\epsilon$ bis $+\epsilon$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx - g \psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx = 0$$

↑
für $\epsilon \rightarrow 0$
da ψ stetig

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(\epsilon) - \psi'(0)) - g \psi(0) = 0$$

Für δ -Potential ("unendl. Sprungstelle") hat ψ' Sprungstelle

Ansatz

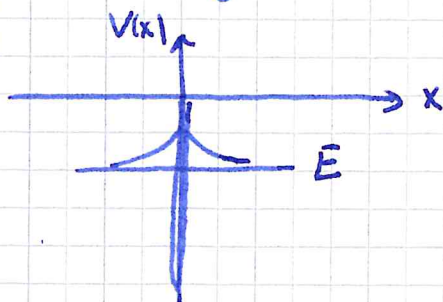
$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (-k - k) - g = 0$$

$$\Leftrightarrow k = \frac{mg}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}}$$

δ -Potential hat genau einen gebundenen Zustand

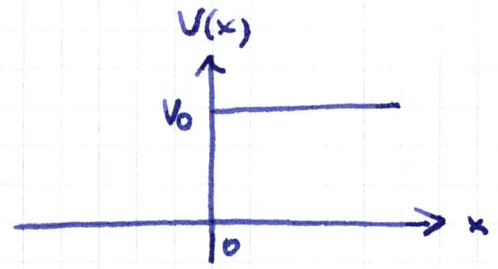
→ Überlegen Sie sich das für endl. Potentialtopf
für $L \rightarrow 0$ und V_0 entsprechend
skaliert



4.4 Potentialstufe

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , x < 0 \\ V_0 & , x > 0 \end{cases}$$

" $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



Fall $0 < E < V_0$ mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\text{Ansatz } \Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & , x < 0 \quad \text{I} \\ \tau e^{-k'x} & , x > 0 \quad \text{II} \end{cases}$$

$x < 0$: einlaufende + (-x Richtung laufende =) reflektierte Wellen

$x > 0$: Wellenpaket dringt in klassisch unzulässigen Bereich ein

Bemerkung:

Wir betrachten hier Streuzustände von ebenen Wellen in I
 → nicht normierbar, physikalische Lösungen sind

Wellenpakete, die sich aus Streuzuständen zusammensetzen
 freies Wellenpaket

$$\Psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi} \varphi(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

Wellenpaket aus Streuzuständen in I ist nichtstationär

$$\Psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi} \varphi(k) (e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}) e^{-i\omega t}$$

für $t \ll 0$ einlaufendes Wellenpaket

für $t \gg 0$ reflektiertes Wellenpaket

folgt aus Lösung der zeitabh. Schrödinger-Glg.

Einsetzen in Schrödinger-Glg.

(34)

$$\textcircled{\text{I}} \quad E \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \psi(x)$$

$$\textcircled{\text{II}} \quad E \psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \psi(x)$$

$$\Rightarrow \boxed{k' = \sqrt{k^2 - k'^2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Stetigkeit bei $x=0$

$$\frac{\psi'(0^-)}{\psi(0^-)} = \frac{ik(1-r)}{1+r} = -k' = \frac{\psi'(0^+)}{\psi(0^+)}$$

$$\Rightarrow r(k) = \frac{1 - i \frac{k'}{k}}{1 + i \frac{k'}{k}}$$

Betrachte Wahrscheinlichkeitsstromdichte (Teilchenstrom)

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

Teilchenstrom der einlaufenden Welle

$$j_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{2mi} (ik - (-ik)) = \frac{\hbar k}{m}$$

e^{ikx}
Teil in $\textcircled{\text{I}}$

... der reflektierten Welle

$$j_{\text{refl.}} = \frac{\hbar}{2mi} (-ik|r|^2 - ik|r|^2) = |r|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

e^{-ikx}
Teil in $\textcircled{\text{I}}$

⇒ Reflexionskoeffizient $R = \left| \frac{j_{refl.}}{j_{ein}} \right|$
 = Ws dass Teilchen reflektiert und nicht durch Pot.stufe durchläuft (zu $x \rightarrow \infty$)

$$\Rightarrow R = |r|^2 = \left| \frac{1 - i \frac{k'}{k}}{1 + i \frac{k'}{k}} \right|^2 = 1$$

→ totale Reflexion für $E < V_0$

aber trotzdem Ws, Teilchen bei $x > 0$ zu finden

$$|\Psi(x > 0)|^2 dx = |\tau|^2 e^{-2k'x} dx \neq 0$$

mit $\tau = 1 + r$ aus $\Psi(0^-) = \Psi(0^+)$

Fall $E > V_0$

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & , x < 0 \\ \tau e^{ik'x} & , x > 0 \end{cases}$$

Einsetzen in Schrödinger-Gl.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

$$\Rightarrow k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{(k^2 - Q^2)/\hbar^2}}$$

Stetigkeit bei $x = 0$

$$\frac{\Psi'(0^-)}{\Psi(0^-)} = ik \frac{(1-r)}{(1+r)} = ik' = \frac{\Psi'(0^+)}{\Psi(0^+)}$$

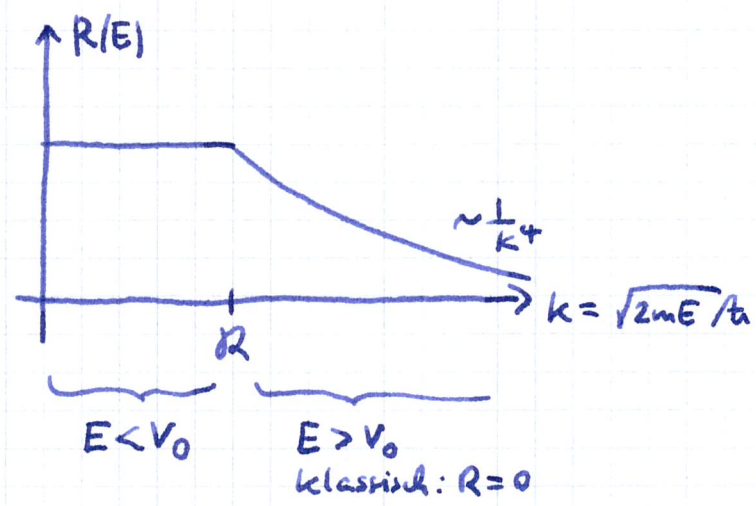
$$\Rightarrow r = \frac{1 - \frac{k'}{k}}{1 + \frac{k'}{k}} = \frac{k - k'}{k + k'}$$

=> Reflexionskoeffizient $R = |r|^2 = \frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}$

Spezialfälle: i) $E = V_0 \Leftrightarrow k = R \Rightarrow k' = 0 \Rightarrow R = 1$

ii) $E \gg V_0 \Leftrightarrow k \gg R \Rightarrow k' \approx k - \frac{1}{2} \frac{R^2}{k}$

=> $R \approx \frac{1}{16} \left(\frac{R}{k}\right)^4$



Transmissionskoeffizient $T = \left| \frac{j_{trans}}{j_{ein}} \right|$
= Ws dass Teilchen transmittiert wird

mit $j_{trans} = \frac{\hbar}{2mi} (ik'|\tau|^2 - (-ik')|\tau|^2) = |\tau|^2 \frac{\hbar k'}{m}$
↑
 $j_{in}(\text{II})$

=> $T = |\tau|^2 \frac{k'}{k} = \frac{(k+k'+k-k')^2}{(k+k')^2} \frac{k'}{k} = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$

$l+r=c$
aus Stetigkeit von ψ

Beobachtung $R+T=1 \rightarrow$ Teilchenzahlerhaltung

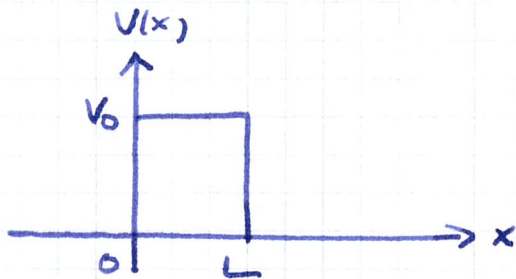
folgt auch aus Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$
da Steuzustände stationär ist $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$

=> $\frac{\partial j}{\partial x} = 0$, d.h. $j = \text{const.} \Rightarrow j_{ein} + j_{ref.} = j_{trans}$
=> $1 = \left| \frac{j_{trans}}{j_{ein}} \right| + \left| \frac{j_{ref.}}{j_{ein}} \right|$

4.5 Potentialbarriere und Tunnelkoeffizient

(37)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & 0 < x < L \\ 0, & x > L \end{cases} \quad V_0 = \frac{\hbar^2 R^2}{2m}$$



Betrachte $0 < E < V_0$

Ansatz:

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & , x < 0 \\ A e^{-k'x} + B e^{k'x} & , 0 < x < L \\ \tau e^{ikx} & , x > L \end{cases}$$

$B \neq 0$ aufgrund von Reflexion an $x=L$

Einsetzen in Schrödinger-Gl. gibt

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar^2 R^2}{2m}$$

$$\Rightarrow k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Stetigkeit bei $x=0$:

$$ik \frac{(1-r)}{(1+r)} = k' \frac{(B-A)}{(A+B)} = \frac{\Psi'(0^+)}{\Psi(0^+)} \Rightarrow ik \frac{1-r}{1+r} = k' \frac{1 - \frac{A}{B}}{1 + \frac{A}{B}} \quad (*)$$

Stetigkeit bei $x=L$:

$$k' \frac{B e^{k'L} - A e^{-k'L}}{A e^{-k'L} + B e^{k'L}} = ik \Rightarrow \frac{A}{B} e^{-2k'L} = \frac{1 - i \frac{k}{k'}}{1 + i \frac{k}{k'}}$$

Aus Gg. (*)

38

$$\Rightarrow r = \frac{1-C}{1+C} \quad \text{mit} \quad C = -i \frac{k'}{k} \frac{1 - \frac{A}{B}}{1 + \frac{A}{B}}$$
$$= \frac{1 + i \frac{k'}{k} \tanh k'L}{1 - i \frac{k'}{k} \tanh k'L}$$

\Rightarrow Transmissionskoeffizient $T = 1 - |r|^2$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right)^2 \sinh^2 k'L}$$

$\frac{V_0^2}{E(V_0-E)}$

$T \neq 0 \rightarrow$ Durchdringen der kl. verbotenen Barriere

\rightarrow Tunneleffekt mit Tunnelebenswahrscheinlichkeit $T(E)$

Für eine große Barriere ist $k'L \gg 1$

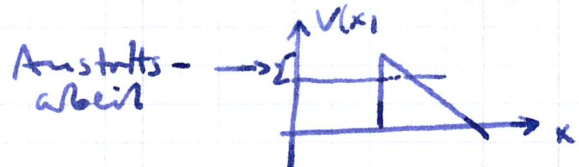
$$\Rightarrow \sinh^2 k'L \approx \frac{1}{4} e^{2k'L}$$

$$\Rightarrow T \approx \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-\frac{2}{\hbar} L \sqrt{2m(V_0-E)}}$$

Beispiele des Tunneleffekts:

- α -Zerfall \rightarrow s. Übung

- Emission von Elektronen aus Metall bei anlegen d. Feld.
"Feldemission"



\rightarrow Grundlage für
Rastertunnelmikroskop