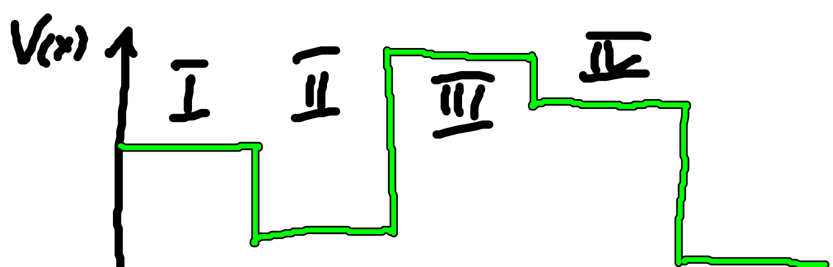
III Ausgewählte stationäre Probleme

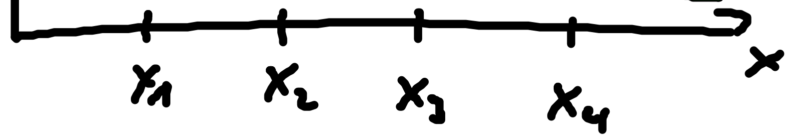
1. Teilchen an der Potentialstufe

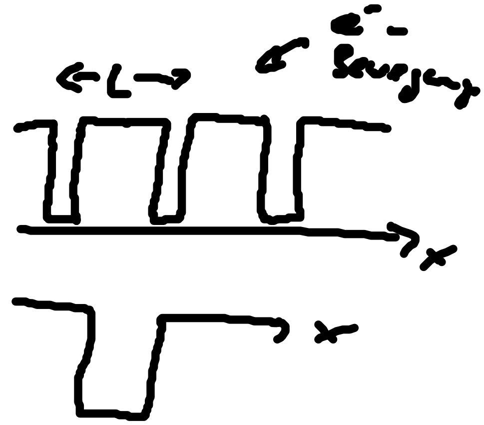
1.1 Eigenschaften der Wellenfunktion

- stückweise konstantes Potential:



(1D-Fall)





- Anwendungen Festkörper / Kernphysik:
  (a) periodische Anordnung v. Ionen
  (b) Atomkern als Potentialtopf

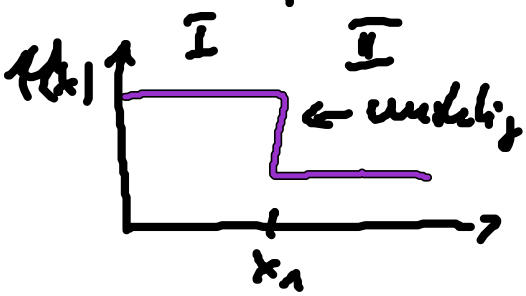
- stationäre SGL: $\underline{H}\psi = E\psi$

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

gesucht: $\psi(x)$, E

Anforderung an die WF ψ bei $x = x_1$: $\psi(x)$, $\partial_x\psi(x)$ sind stetig bei $x = x_1$

über Widerspruchsbeweis:



$$\psi(x) \sim \Theta(x-a)$$
$$\rightarrow \psi'(x) \sim \delta(x-a)$$
$$\psi''(x) \sim \delta'(x-a) \;\lightning$$

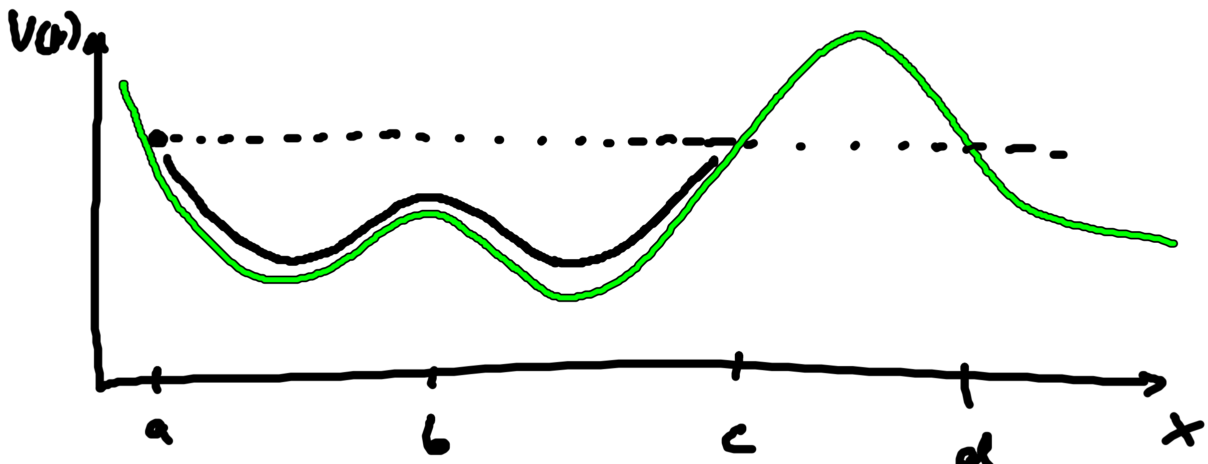
Widerspruch, da rhs $(E - V(x))\psi(x)$ nur eine Sprungstelle hat und nicht δ- oder δ'-förmig ist.

$\rightarrow$ Stetigkeitsbedingung für WF im stückweise konst. Potential:

$$\boxed{\begin{array}{ll} (1) & \psi_I(x_1) = \psi_{II}(x_1) \\ (2) & \psi_I'(x_1) = \psi_{II}'(x_1) \end{array}}$$

→ wir erhalten Lsg. der SGl. $\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi$ durch Freiteilchenlösung + Stetigkeitsbed.

1.2 Wdh.: klass. Teilchen in Potentiallandschaft



$E_a > E_b$ $E_a = E_c$ $E_a = E_d$

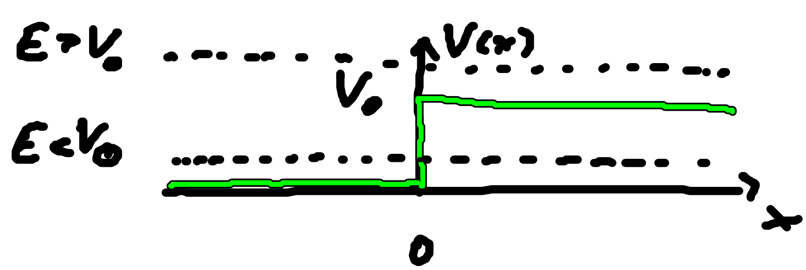
$a \longrightarrow b \longrightarrow c \not\longrightarrow d$

$\longleftarrow$ „zurückrollen“ klass. verbotener Übergang

quantenmechanisch: $c \to d$ erlaubt (qm. Tunneleffekt)

1.3 Einzelne Potentialstufe

• Potential: $V(x) = V_0\, \Theta(x)$ $\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$



Sprungstelle im Potential

• klass. Mechanik:

(1) $E < V_0$ $\longrightarrow$ Reflexion (Teilchen kann nicht über Pot.stufe gelangen)

(2) $E > V_0$ $\longrightarrow$ Transmission (Teilchen gelangt über Stufe)

- QM: Lösen der SGl. $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$

Bereich I: $V=0$ Bereich II: $V=V_0$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \qquad\qquad \psi'' = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi$$

geht so nur bei stückweise konst. Potentialen

- Forderung: Lsg.en der beiden Bereiche müssen $x=0$ stetig aneinander angepasst werden

$$\psi_{I}(x=0) \overset{!}{=} \psi_{II}(x=0) \quad \text{und} \quad \psi'_{I}(x=0) \overset{!}{=} \psi'_{I}(x=0)$$

- Fallunterscheidung: $E > V_0$ und $E < V_0$

(a) Teilchen oberhalb der Pot.stufe ($E>V_0$)

- Bereich I: $\psi'' = -k^2\psi$, $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$

  Bereich II: $\psi'' = -q^2\psi$, $q = \pm\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

$\longrightarrow$ beide Gl. sind SGl.:

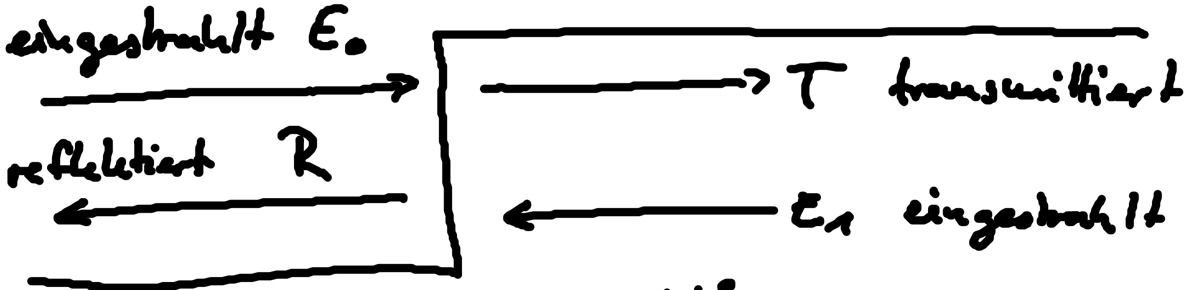
I: $e^{\pm ikx}$ II: $e^{\pm iqx}$ (Freiteilchen Lsg)

- Ansatz Lsg. als Linearkombination:

$$\Psi_{I}(x) = E_0\, e^{ikx} + R\, e^{-ikx}$$
$$\Psi_{II}(x) = E_1\, e^{-iqx} + T\, e^{iqx}$$

unbekannte Konstanten E_0, E_1, R, T

- Interpretation:



(die volle Lsg. wäre $e^{\pm ikx} \cdot e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$, Separationsansatz)

$\omega(k)$

- Koeffizienten:

(i) Teilchen läuft von links auf Stufe
→ kein Teilchen von rechts

$$E_1 = 0$$

(ii) Normierung der WF

$$E_0 = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

(iii) R
(iv) T
zu bestimmen

- Anwenden der Stetigkeitsbed. für die WF bei $x=0$

(1) Stetigkeit der WF: $\Psi_{I}(x)\big|_{x=0} \overset{!}{=} \Psi_{II}(x)\big|$

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + R e^{-ikx} \Big|_{x=0} \overset{!}{=} T e^{iqx} \Big|_{x=0}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{\sqrt{L}} + R = T} \quad \Leftrightarrow \quad R = T - \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (\#)$$

(ii) Stetigkeit der Ableitung: $\psi_I'(x)\big|_{x=0} = \psi_{II}'(x)\big|_{x=0}$

$$ik \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} - ikR e^{-ikx} \Big|_{x=0} = iqT e^{iqx} \Big|_{x=0}$$

$$\Rightarrow \boxed{ik\left(\frac{1}{\sqrt{L}} - R\right) = iqT} \quad (*)$$

(iii) Bestimmen d. Transmission: (#) in (*) einsetzen

$$k\left(\frac{1}{\sqrt{L}} - T + \frac{1}{\sqrt{L}}\right) = qT$$

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{2k}{\sqrt{L}\,(q+k)}}$$

(iv) Bestimmen der Reflexion: T in (#) einsetzen

$$R = T - \frac{1}{\sqrt{L}} = \frac{2k}{\sqrt{L}\,(q+k)} - \frac{1}{\sqrt{L}} = \frac{2k-q-k}{\sqrt{L}\,(q+k)} = \frac{k-q}{\sqrt{L}\,(k+q)}$$

$$\Rightarrow \boxed{R = \frac{k-q}{\sqrt{L}\,(k+q)}}$$

R, T als Fkt von q, k (bzw. V_0, E) bestimmt.

Damit ist die vollständige Lsg. von $\psi(x)$ bekannt, da V_0 (Pot.stufe) als auch E (Teilchenenergie) des einlaufenden Teilchens bekannt sind.

- Wellenfunktion: $\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + R e^{-ikx}$

$$\psi_{II}(x) = T e^{iqx}$$

mit $R = R(q,k) \;\to\; q = q(E) = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

$T = T(q,k) \;\to\; k = k(E) = \sqrt{2mE}/\hbar$

- Bemerkungen:

(i) Stetigkeit? $\psi_I(x)\big|_{x=0} = \psi_{II}(x)\big|_{x=0}$

$$\frac{1}{\sqrt{L}} + \frac{1}{\sqrt{L}}\frac{k-q}{k+q} \overset{!}{=} \frac{2k}{\sqrt{L}(k+q)}$$ ✓

(ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\psi|^2$: $\tilde{R} = \frac{R}{\sqrt{L}}$, $\tilde{T} = \frac{T}{\sqrt{L}}$

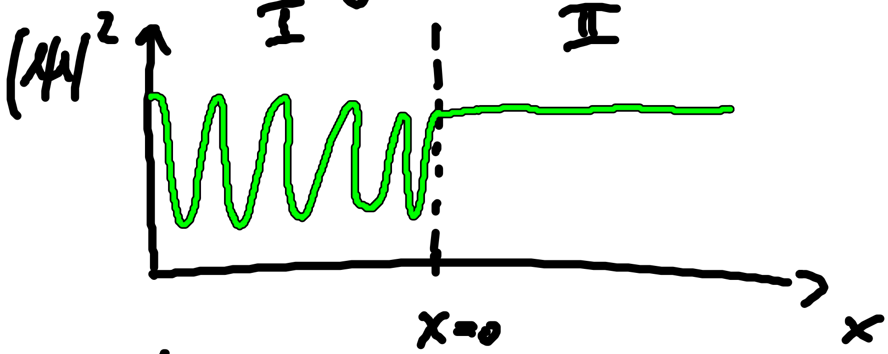
$$|\psi_I|^2 = \frac{1}{L}\left(e^{ikx} + \tilde{R} e^{-ikx}\right)\left(e^{-ikx} + \tilde{R}^* e^{ikx}\right)$$

$$= \frac{1}{L}\left(1 + \tilde{R}^* e^{i2kx} + \tilde{R} e^{-i2kx} + |\tilde{R}|^2\right) \qquad \tilde{R}^* = \tilde{R}$$

$$= \frac{1}{L}\Big(\underbrace{1 + |\tilde{R}|^2}_{\text{const}} + \underbrace{2\tilde{R}\cos(2kx)}_{\text{oszilliert im Ort}}\Big)$$

$$|\psi_{II}|^2 = \frac{|\tilde{T}|^2}{L} = \text{const}$$

• Darstellung der AWD:



Interferenz von einlaufender und reflektierter Welle

W.dichte mit der das Teilchen die Pot.stufe überwindet

(iii) W.stromdichte $\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi}\left\{\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi\right\}$

Dazu Ψ_{I} und Ψ_{II} einsetzen

$$j_{I}^{x} = \frac{\hbar k}{mL}\left(1-|\tilde{R}|^2\right) \quad , \quad j_{II}^{x} = \frac{\hbar q}{mL}|\tilde{T}|^2$$

$$= \frac{\hbar k}{mL} - \frac{\hbar k}{mL}|\tilde{R}|^2 \qquad\qquad = j_{trans}$$

$$= j_{ein} - j_{refl.}$$

→ Definition des Transmissionskoeff. t:

$$\boxed{t = \frac{j_{trans}}{j_{ein}} = \frac{q}{k}|\tilde{T}|^2 = \frac{q}{k}\left|\frac{2k}{k+q}\right|^2} \neq 0$$

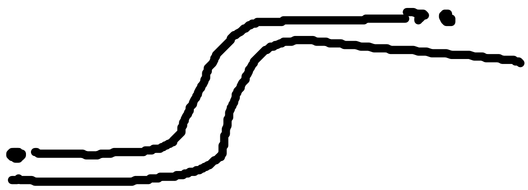
→ Definition des Reflexionskoeff. r:

$$\boxed{r = \frac{j_{ref}}{j_{ein}} = |\tilde{R}|^2 = \left|\frac{k-q}{k+q}\right|^2} \neq 0 \quad \text{für } q \neq k$$

(iv) Vergleich für ($E > V_0$) zwischen klass. u. qm

klass.

Teilchen passiert. Pot. stufe u. bewegt sich mit geringerer Geschwindigkeit

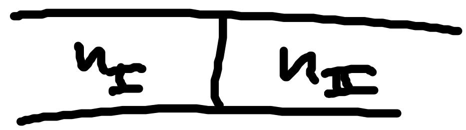


$$v_I < v_{II}$$

$$\underset{\frac{m}{2}v_I^2}{E_I} = V_0 + \underset{\frac{m}{2}v_{II}^2}{E_{II}}$$

qm

- Teilchen wird mit gewisser W. an der Stufe reflektiert (Interferenz)
- QM Reflexion ist typ. Wellenphänomene, analog zu Licht



$$n_I < n_{II}$$

$$\frac{c}{n_I} > \frac{c}{n_{II}}$$

- Verringerung der Lichtgeschw. beim passieren einer Brechzahlstufe + Interferenzphänom.

$\Rightarrow$ klass. Grenzfall: $E \gg V_0$

$$\sqrt{2mE}/\hbar = k \approx q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$$

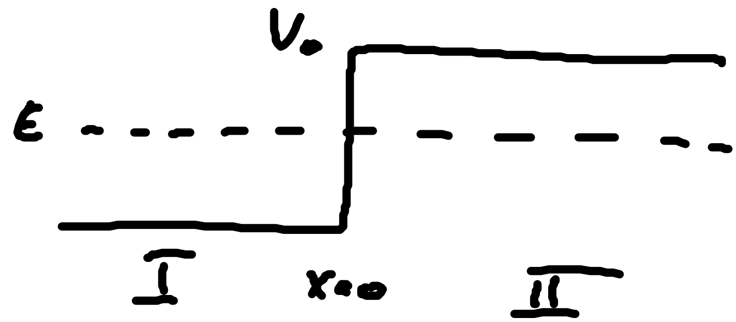
$$R = \frac{k-q}{k+q} \longrightarrow 0 \quad , \quad T = \frac{2k}{k+q} \longrightarrow 1$$

Es ex. <u>keine</u> reflektierte Welle ($R=0$), dass heißt der Grenzfall der klass. Mechanik.

(6) Teilchen unterhalb der Pot. stufe $E < V_0$

– klass.: „Abrollen des Teilchens“ u. zurückrollen

- Pot.:



Bereich I: $\psi'' = -k^2\psi$ $\boxed{k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar}$

Bereich II: $\psi'' = \varkappa^2\psi$ $\varkappa = \pm\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

$\to$ können Lsg. (a) ($E > V_0$) verwenden, wenn wir $\varkappa = \pm i q$ setzt

$= \pm i\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

$\boxed{\varkappa = \pm i q}$ aus (a)

$\to$ Lösung:

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(e^{ikx} + \tilde{R}e^{-ikx}\right)$$

$q = + i\varkappa$

($-$) Lsg. ist nicht normierbar

$e^{+\varkappa x} \to \infty$

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{L}}\tilde{T}e^{iqx} = \frac{1}{\sqrt{L}}\tilde{T}e^{-\varkappa x}$$

$$\to \tilde{R} = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa}, \quad \tilde{T} = \frac{2k}{k + i\varkappa}$$

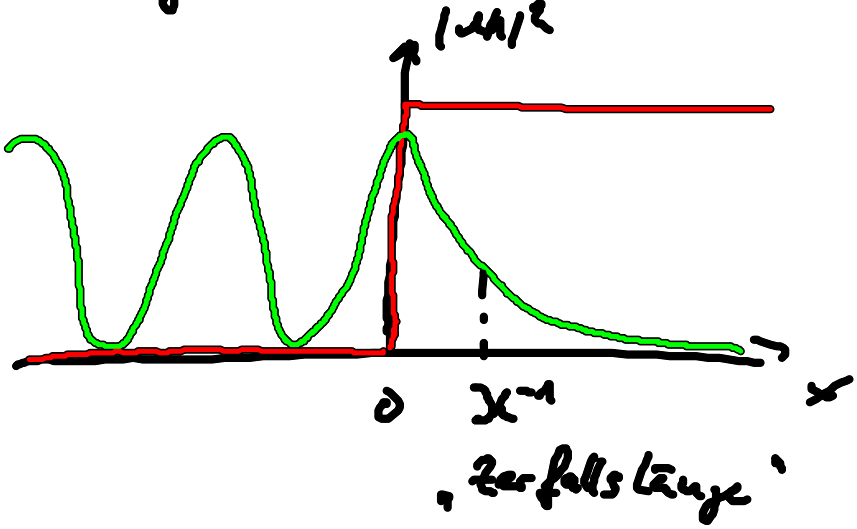
- Bemerkungen:

(i) W.dichte $|\psi(x)|^2$:

QM erlaubt ein Eindringen des Teilchens in die Potentialstufe, da

$$\psi_{II} = \frac{T}{\sqrt{L}} e^{-\kappa x} \neq 0 \rightarrow |\psi_{II}|^2 = \frac{|T|^2}{L} e^{-2\kappa x} \neq 0$$

→ klingt exponentiell ab, aber $\neq 0$



→ einige Teilchen werden bei einem Exp. in der Potentialstufe zu finden sein!

(ii) es gibt keinen W.fluß in die Stufe: Teilchenstrom nach rechts verschwindet

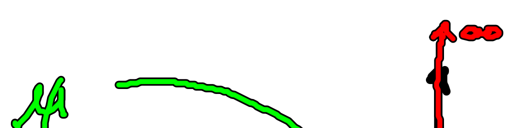
$$j_{II} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{II}^*(\nabla\psi_{II}) - \psi_{II}(\nabla\psi_{II}^*)\right) = 0$$

(iii) Grenzfall zu ∞ hoher Stufe: $V_0 \rightarrow \infty$

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \rightarrow \infty$$

$$\tilde{T} = \frac{2k}{k+i\kappa} \rightarrow 0 \qquad \tilde{R} = \frac{k-i\kappa}{k+i\kappa} \rightarrow 1$$

$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) \rightarrow \psi_I(x=0) = 0$$



Stet.bed. an einer
∞ hohen Stufe ...

∞-hohen Stufe lautet

$$\psi(0)\big|_{\infty\text{-hohe Stufe}} = 0$$

siehe VL ∞-tiefer Pot. topf