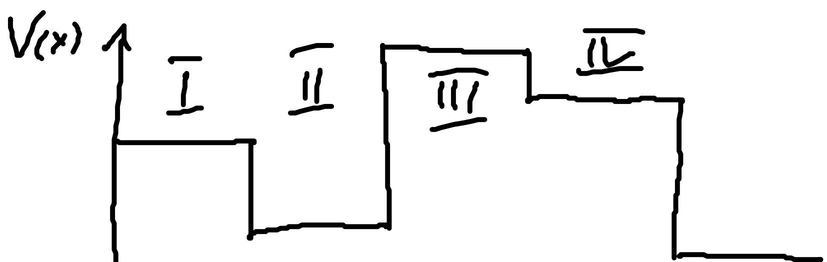
III Ausgewählte stationäre Probleme

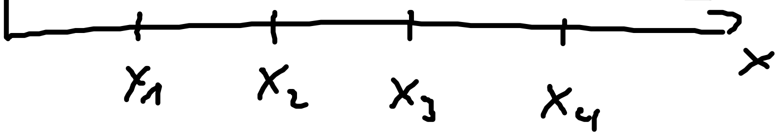
1. Teilchen an der Potentialstufe

1.1 Eigenschaften der Wellenfunktion

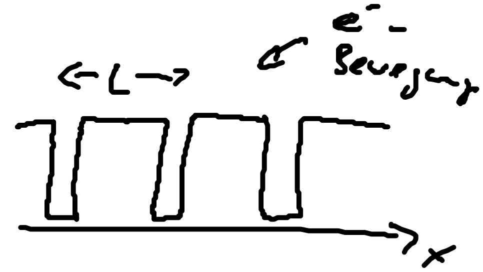
- stückweise konstantes Potential:

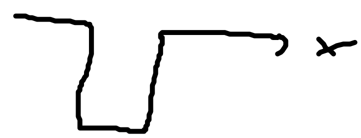


(1D-Fall)



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





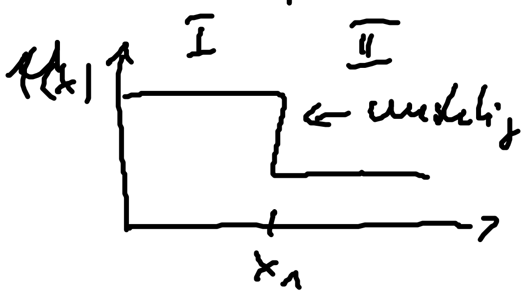
- stationäre SGL: $\underline{H}\Psi = E\Psi$

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

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:



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

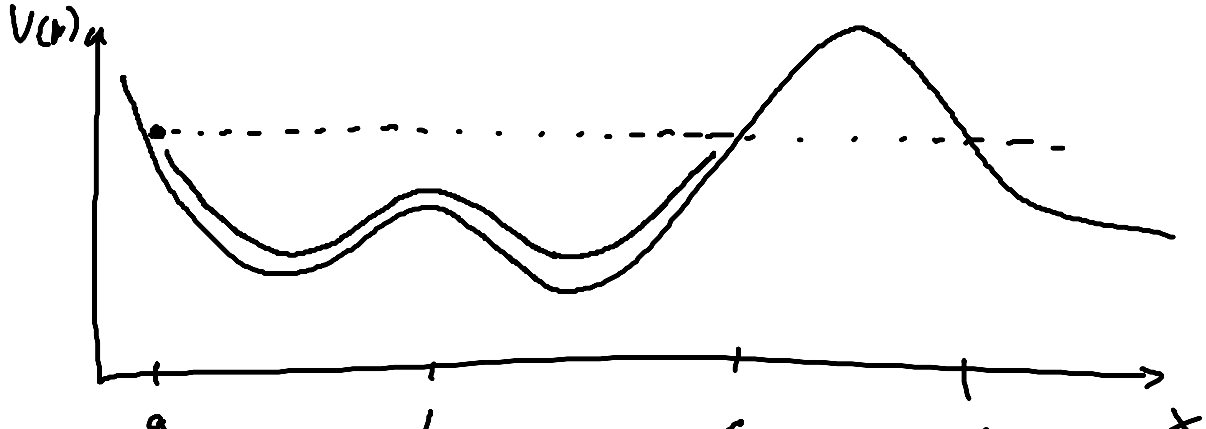
Widerspruch, da rhs $(E - V(x))\Psi(x)$ nur eine Sprungstelle hat und nicht δ- oder δ' förmig ist.

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

$$\boxed{\begin{aligned} &(1)\quad \Psi_{\mathrm{I}}(x_1) = \Psi_{\mathrm{II}}(x_1) \\ &(2)\quad \Psi_{\mathrm{I}}'(x_1) = \Psi_{\mathrm{II}}'(x_1) \end{aligned}}$$

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

1.2 Wdh: klass. Teilchen in Potentiallandschaft



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

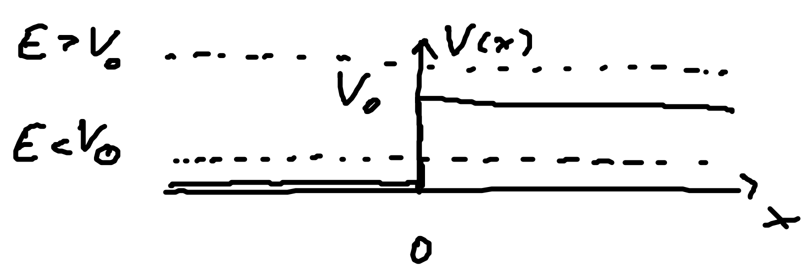
$a \longrightarrow b \longrightarrow c \not\longrightarrow d$

$\longleftarrow$ „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: $V = V_0$

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

$\underbrace{\text{geht so nur bei stückweise konst. Potentialen}}$

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

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

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

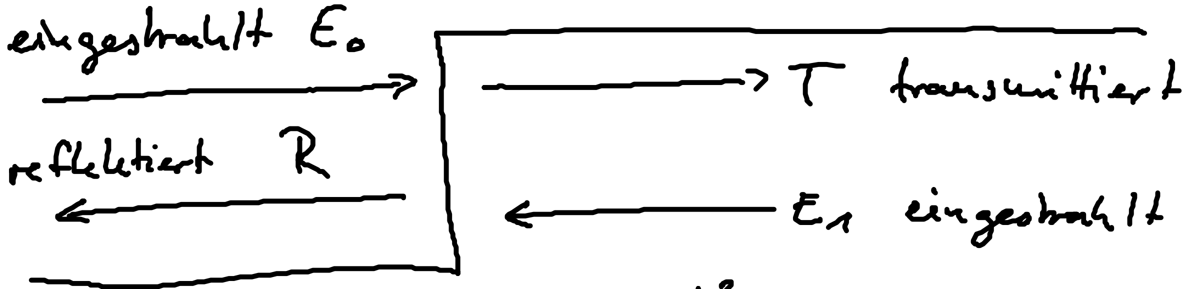
$\longrightarrow$ beide Gl. sind SGl.:

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
  $\rightarrow$ 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 $x=0$

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

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

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

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

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

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

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

- Bemerkungen:

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

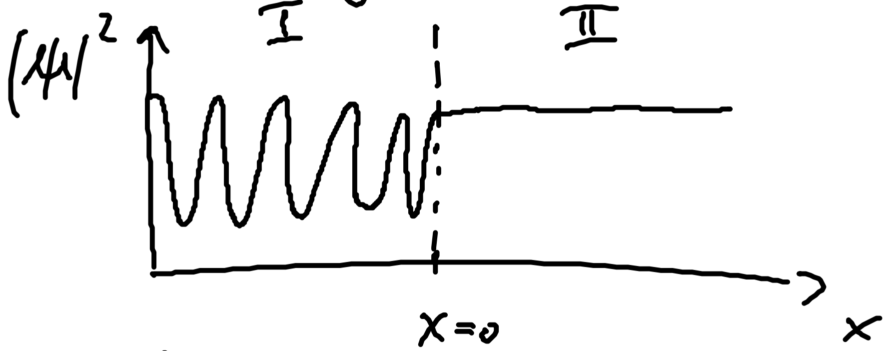
$$\frac{1}{\sqrt{L}} + \frac{1}{\sqrt{L}}\frac{k-q}{k+q} \overset{!}{=} \frac{2k}{\sqrt{L}(k+q)} \quad \checkmark$$

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

$$|\psi_I|^2 = \frac{1}{L}\left(e^{ikx} + \tilde{R} e^{-ikx}\right)\left(e^{-ikx} + \tilde{R}^* e^{ikx}\right)$$
$$= \frac{1}{L}\left(1 + \tilde{R}^* e^{i2kx} + \tilde{R} e^{-i2kx} + |\tilde{R}|^2\right) \qquad \tilde{R}^* = \tilde{R}$$
$$= \frac{1}{L}\left(\underbrace{1 + |\tilde{R}|^2}_{\text{const}} + \underbrace{2\tilde{R}\cos(2kx)}_{\text{oszilliert im Ort}}\right)$$

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

· 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

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

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

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

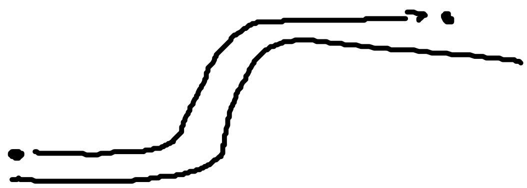
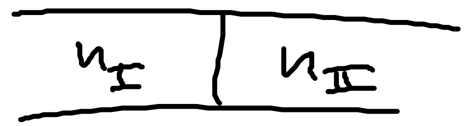
→ Definition des Transmissionskoeff. t:

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

→ 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.	qm
Teilchen passiert. Pot. stufe u. bewegt sich mit geringerer Geschwindigkeit	– Teilchen wird mit gewisser W. an der Stufe reflektiert (Interferenz)
	– QM Reflexion ist typ. Wellenphänomene, analog zu Licht
$v_I < v_{II}$	
$E_I = V_0 + E_{II}$	$n_I < n_{II}$
$\frac{m}{2} v_I^2 \qquad \frac{m}{2} v_{II}^2$	$\frac{c}{n_I} > \frac{c}{n_{II}}$
	– Verringerung der Lichtgeschw. beim passieren einer Brechzahlstufe + Interferenzphänom.

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

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

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

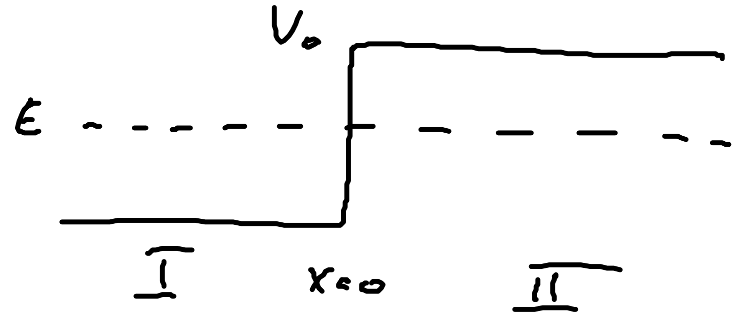
Es ex. <u>keine</u> reflektierte Welle ($R=0$), dass heißt der Grenzfall der klass. Mechanik.

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

– klass.: „Abprallen des Teilchens“ u. zurück

u. Eindringtiefe

- Pot.:



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

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

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

→ können Lsg. (a) ($E > V_0$) verwenden, wenn wir $\varkappa = \pm i q$ setzt $\qquad \boxed{\varkappa = \pm i q}$ aus (a)

→ Lösung:

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

$q = \oplus i\varkappa$

(−) Lsg. ist nicht normierbar

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

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

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

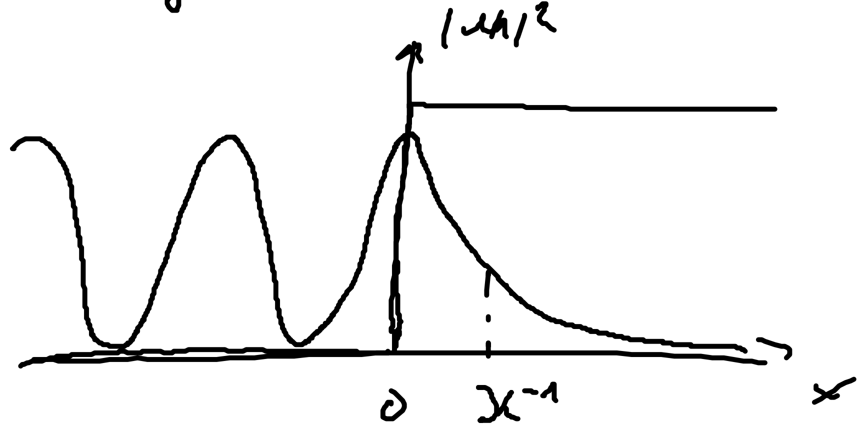
- Bemerkungen:

(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 $\neq 0$



„Zerfallslänge"

→ 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

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

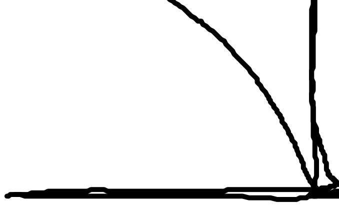
(iii) Grenzfall zu ∞ hoher Stufe: $V_0 \rightarrow \infty$

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

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

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

Stet. bed. an einer



∞-hohen Stufe lautet

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

siehe VL ∞-tiefer Pot. topf