

## 2. Quanten in Kästen und Töpfen: Potenzialtopf, Potenzialstufe, Potentialschwelle (Tunneleffekt)

### 2.1 Eindimensionale Bewegung eines qmT im zeitunabhängigen Potenzial $U(x)$

Bei eindimensionaler Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial  $U(x)$  ist die WF

$$\tilde{\psi}(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

wobei  $\psi(x)$  die Lösung der stationären SG

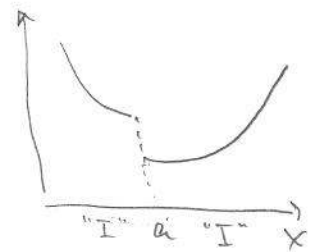
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

und  $E$  die der WF  $\psi(x)$  entsprechende Energie des qmT ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) (und die qm Erwartungswerte, s.u.) ist zeitunabhängig (stationärer Zustand)

$$|\tilde{\psi}(x, t)|^2 = \tilde{\psi}(x, t)\tilde{\psi}^*(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi^*(x)e^{+\frac{iEt}{\hbar}} = \psi(x)\psi^*(x) = |\psi(x)|^2.$$

Physikalisch relevant sind die normierbaren, eindeutigen, stetigen und stetig differenzierbaren<sup>1)</sup> Lösungen von (2.1).

$U(x)$



- **Stetigkeit der WF.** Beachte<sup>1)</sup>:

(i) Ist  $U(x)$  stetig in  $x = a$ , dann ist wegen (2.1)  $\psi''|_a$  stetig. Damit sind  $\psi'|_a$  und  $\psi(a)$  stetig differenzierbar in  $a$ .

(ii) Hat  $U(x)$  einen endlichen Sprung in  $x = a$ , sind  $\psi'|_a$  und  $\psi(a)$  stetig und es gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(a - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(a + \varepsilon), \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'|_{a-\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'|_{a+\varepsilon}$$

kurz:  $\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$ ,  $\psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)$ .

Beweis durch Annahme des Gegenteils: Hätte  $\psi(x)$  einen Sprung bei  $x = a$ , also  $\psi(x) \sim \theta(x - a)$ , folgte  $\psi''(a) \sim \delta'(x - a)$ . Hätte  $\psi'(x)$  einen Sprung bei  $x = a$ , also  $\psi'(x) \sim \theta(x - a)$ , folgte  $\psi''(a) \sim \delta(x - a)$ . Beides stünde im Widerspruch zu

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi(x),$$

denn links hätten wir einen unendlich, rechts einen endlich großen Sprung an der Stelle  $x = a$ .

- **Entartung der WF.**

Seien  $\psi_1$  und  $\psi_2$  Lösungen von (2.1). Dann gilt (Punkte mit  $\psi_{1/2} = 0$  ausgenommen)

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \text{ also } \psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1 = \text{const.}$$

Strebt die WF am Rand des zugänglichen Raumbereichs gegen Null, folgt

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \text{ dh. } \psi_1 = C \psi_2. \quad (*)$$

Da die WF normiert sein müssen, ist  $C = 1$ .

$$\left( \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_1(x)|^2}_1 = C C^* \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_2(x)|^2}_1 \right).$$

Damit existiert zu jedem Wert der Energie genau eine WF  $\psi(x)$ , man sagt, alle Energieniveaus des diskreten Spektrums/der gebundenen Zustände (s.u.) sind nicht entartet.

- **Symmetrie/Parität der WF**

Ist  $U(x)$  symmetrisch,  $U(x) = U(-x)$ , dann ist mit  $\psi(x)$  auch  $\psi(-x)$  Lösung von (2.1) zum Energiewert  $E$ , denn unter Verwendung von (\*) (s. o.) folgt

$$\psi(x) = C \psi(-x) = C C \psi(-(-x)) = C^2 \psi(x), \text{ also } C = \pm 1 \text{ und damit } \psi(x) = \begin{cases} \psi(-x) \\ -\psi(-x) \end{cases} :$$

Bei Bewegung in  $U(x) = U(-x)$  sind die WF gerade oder ungerade Funktionen von  $x$ .

- **Reellwertige WF**

Da  $U(x)$  reell, ist mit  $\psi(x)$  auch  $\psi^*(x)$  und (Gleichung linear !) die reellwertigen Kombinationen  $\psi(x) + \psi^*(x)$  oder  $i[\psi(x) - \psi^*(x)]$  sind Lösung der stationären SG (2.1).  
Damit können wir uns von vorn herein auf reellwertigen Lösungen beschränken.

**FAZIT:** Physikalisch relevant sind die normierbaren (quadratisch integrierbaren), eindeutigen (wenigstens  $\psi, \psi^*$  sei eindeutig), stetigen und stetig differenzierbaren, nichtentarteten, reellen Lösungen von (2.1), die im symmetrischen Fall gerade oder ungerade sind.

## 2.2 Eindimensionale Bewegung qmT im stückweise konstanten Potenzial $U(x) = U_0$

→ „Quanten in Kästen und Töpfen“, Approximation ortsabhängiger durch stückweise konstante Potenziale ...

$$\text{SG: } -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (U_0 - E)\psi(x) = 0 \rightarrow \text{Schwingungsgleichung (HO)}$$

$$\text{Exponentialansatz: } \psi(x) \sim e^{\lambda x} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 + (U_0 - E) = 0 \rightarrow \lambda_{1/2} = \pm\lambda, \lambda = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

**A:  $E > U_0 \rightarrow$  klassisch erlaubter Bereich**

$\lambda$  imaginär  $\rightarrow$  setze  $\lambda = ik$ ,  $k := \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$  reell

$$\psi(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{nach rechts}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\text{nach links}} \quad \text{laufende de Broglie-Welle mit } p = \hbar k = \pm\sqrt{2m(E - U_0)} \text{ d.h.}$$

wie in der KM  $\frac{p^2}{2m} = E - U_0$ . WF ist die eines freien qmT, lediglich  $E$  ist durch  $E - U_0$  zu ersetzen. Typisch im klassisch erlaubten Bereich ist oszillatorisches Verhalten der WF.

**B:  $E < U_0 \rightarrow$  klassisch verbotener Bereich**

$$\lambda \text{ reell} \rightarrow \psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}.$$

Endliche AWD im klassisch verbotenen Bereich! QmT können in diese Bereiche eindringen, daher Potentialbarrieren überwinden usw.

Ist der klassisch verbotene Bereich  $x_0 < x < \infty$ , folgt aus der Normierungsbedingung  $A = 0$ , also  $\psi(x) = B e^{-\lambda x}$ , usw.

Merke: Exponentielles (abklingendes) Verhalten der WF im klassisch verbotenen Bereich.

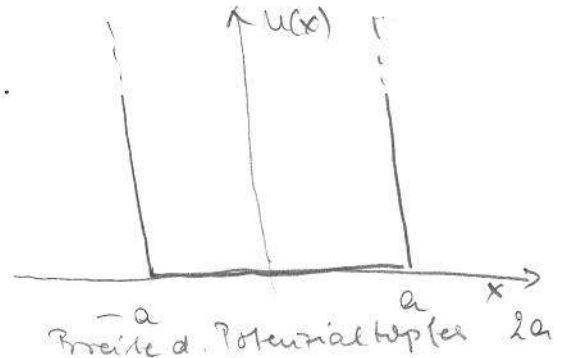
**Zusammenfassung:** Stückweise konstante Potenziale

$$\text{1d stationäre SG: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\text{WF: } \psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & \hbar k = \sqrt{2m(E - U_0)}, \frac{p^2}{2m} = E - U_0, \text{ k reell, klassisch erlaubt} \\ a e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}, & \hbar \lambda = \sqrt{2m(U_0 - E)}, \lambda \text{ reell, klassisch erlaubter Bereich} \end{cases}.$$

### 2.3 Eindimensionale Bewegung qmT im Potenzialtopf. Diskrete Energieniveaus.

A: Potenzialtopf mit  $\infty$  hohen Wänden  $U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases}$



außerhalb des Topfes,  $|x| \geq a$ :

$$E < U_0, \text{ also } \psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}.$$

Da  $\lambda = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \rightarrow \infty$  folgt unter Berücksichtigung der Normierungsbedingung

$$\psi(x) = 0, \quad |x| \geq a.$$

innerhalb des Topfes,  $|x| < a$ :

$$E > U_0 = 0, \text{ also } \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \text{ mit } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

WF sind reell sowie gerade oder ungerade, da  $U(x) = U(-x)$  gerade und reell.

Gerade WF: Aus  $\psi(x) = \psi(-x)$  folgt  $A = B$  und  $\psi(x) = 2A \cos(kx)$

Randbedingung/Stetigkeit bei  $x = \pm a$  ergibt  $\cos(ka) = 0$ , also  $k = \frac{n\pi}{2a}$ ,  $n = 1, 3, 5, \dots$  diskret !!

Ungerade WF: Aus  $\psi(x) = -\psi(-x)$  folgt  $A = -B$  und  $\psi(x) = -2iA \sin(kx)$

Randbedingung/Stetigkeit bei  $x = \pm a$  ergibt  $\sin(ka) = 0$ , also  $k = \frac{n\pi}{2a}$ ,  $n = 2, 4, 6, \dots$  diskret !!

Aufgrund der diskreten Werte für  $k$  sind auch die Werte für die zu den WF gehörenden Werte der Energie diskret:

$$k \rightarrow k_n \text{ führt auf } E \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

→ diskretes Energiespektrum für die Bewegung qmT im unendlich tiefen Potenzialtopf.

Normierung der WF: Unter Verwendung von  $\int_{-a}^a dx \cos^2(k_n x) = \int_{-a}^a dx \sin^2(k_n x) = a$  <sup>1)</sup> folgt

für die Normierungskonstante C in  $\psi_n(x) = C \begin{cases} \cos(k_n x), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin(k_n x), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$  sofort  $C = \frac{1}{\sqrt{a}}$ .

$$\begin{aligned} I &:= \int_{-a}^a dx \cos^2(k_n x) = \int_{-a}^a \frac{1}{k_n} d(\sin(k_n x)) \cos(k_n x) = \underbrace{\sin(k_n x) \cos(k_n x)}_0 \Big|_{-a}^a - \frac{1}{k_n} \int_{-a}^a \sin(k_n x) (-k_n \sin(k_n x)) dx = \\ &= \int_{-a}^a dx \sin^2(k_n x) = \int_{-a}^a dx (1 - \cos^2(k_n x)) \rightarrow 2I = \int_{-a}^a dx = 2a \end{aligned}$$

**Fazit:** Im unendlich tiefen Potenzialtopf gilt

(i)  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

→ diskretes Energiespektrum

→ Abstand benachbarter Energieniveaus wächst proportional zu n

→ je breiter der Topf, desto enger liegen benachbarte Energieniveaus

(ii)  $\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad \text{für } |x| < a$

$0, \quad \text{für } |x| > a$

→ WF mit n - 1 Knoten, gerade oder ungerade und reell.

$$(iii) \quad \psi_n(x)\psi_n^*(x) = \begin{cases} \frac{1}{a} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ 0, & \text{für } |x| > a \end{cases} \quad \text{für } |x| < a$$

→ Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte mit n Maxima innerhalb  $|x| < a$ .

Beispiele:

- $n = 1 \rightarrow$  Grundzustand

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \neq 0 (!); \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \rightarrow \text{kein Knoten}; \quad \psi_1^2(x) = \frac{1}{a} \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \rightarrow$$

maximal im Zentrum  $x = 0$  des Potenzialtopfes

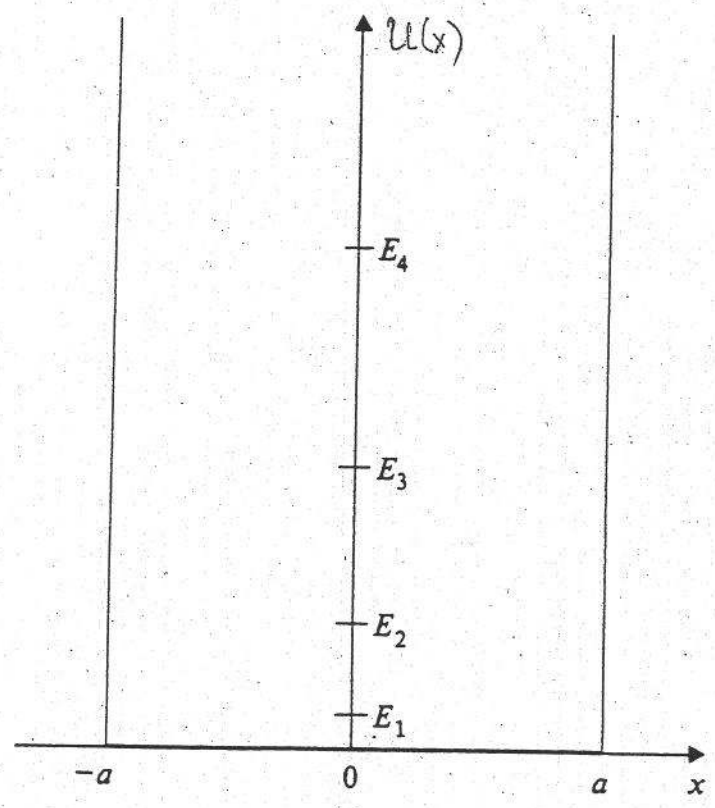
- $n = 2 \rightarrow$  erster angeregter Zustand

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}; \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \rightarrow \text{ein Knoten}; \quad \psi_2^2(x) = \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \rightarrow \text{Maxima der}$$

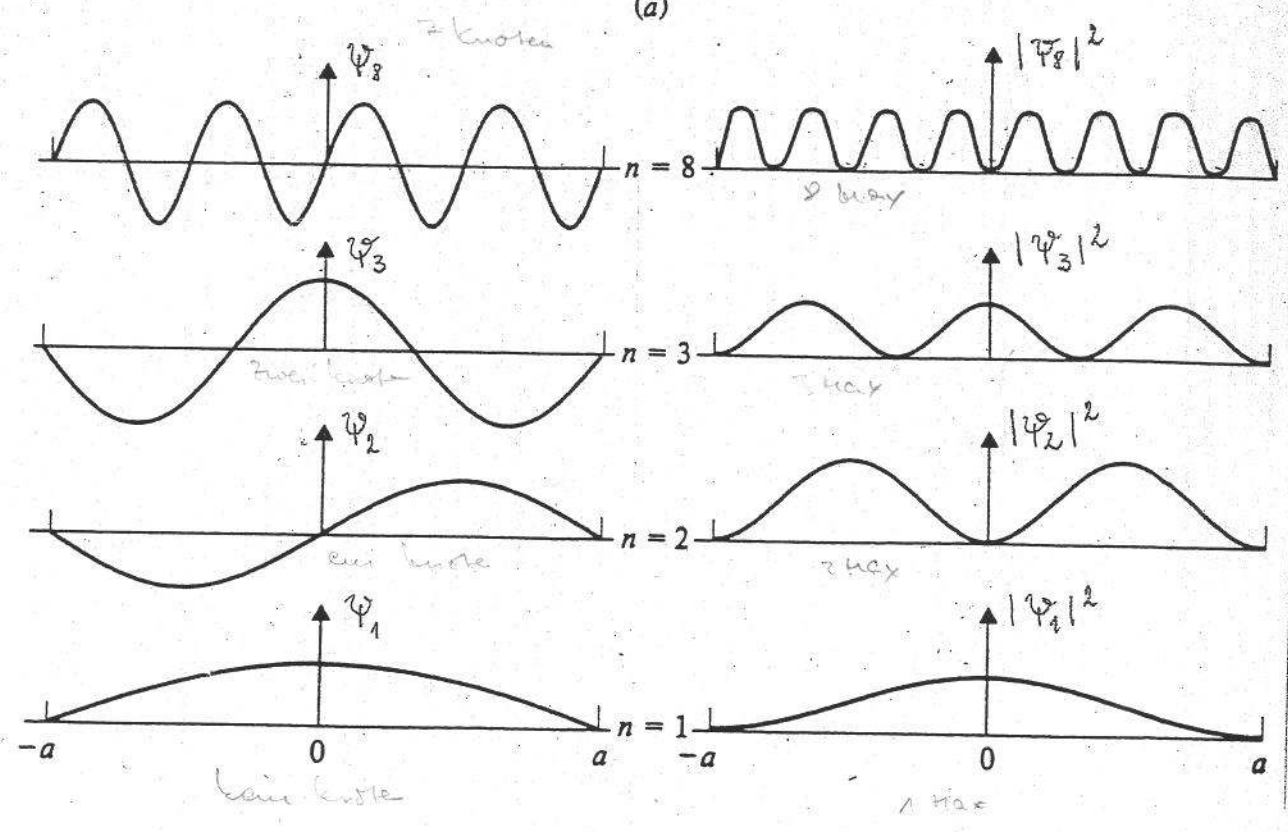
Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei  $x = \pm \frac{a}{2}$

usw. , vgl. Grafiken auf der folgenden Seite

b)

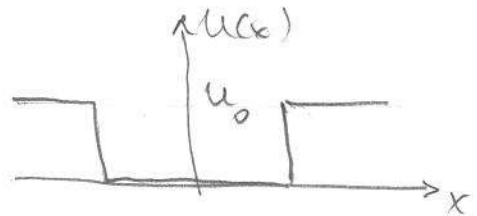


(a)





B: Endlich tiefer Potenzialtopf  $U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ U_0, & |x| \geq a \end{cases}$



Analoge Rechnungen im Fall des endlich tiefen Potenzialtopfes ( $\rightarrow$  Übungsblatt) führen auf die gleichen Schlussfolgerungen (i) – (iii) oben mit modifizierten Ergebnissen für  $E_n$  und  $\psi_n(x)$ ; im Grenzfall  $U_0 \rightarrow \infty$  ergeben sich die hier diskutierten Ausdrücke (einschließlich der Rechtfertigung der Randbedingung  $\psi(\pm a) = 0$ ).

Einfache qualitative Abschätzungen:

- Elektron im Potenzialtopf atomarer Abmessungen  $a \sim 10^{-10}$  m

Mit  $m_e \sim 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg ergibt sich  $E_n \sim 1,5 \cdot 10^{-18} n^2$  J. Die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand ist  $E_2 - E_1 \sim 4,5 \cdot 10^{-18}$  J  $\sim 28$  eV.

Die Wellenlänge eines beim Übergang  $E_2 - E_1$  emittierten Photons betrüge  $\lambda \sim 4,4 \cdot 10^{-7}$  m, das ist die richtige Größenordnung vieler atomarer Übergänge.

- Proton im Atomkern:  $m_p \sim 91,7 \cdot 10^{-27}$  kg,  $a \sim 2 \cdot 10^{-15}$  m

Wir finden  $E_2 - E_1 \sim 5 \cdot 10^{-12}$  J  $\sim 30$  MeV.

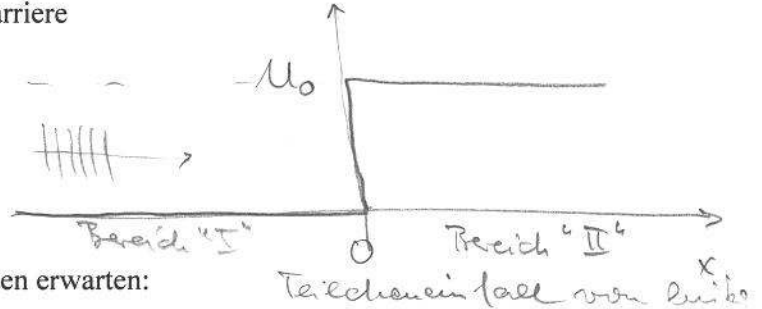
- Salzkorn:  $m \sim 10^{-10}$  kg,  $a \sim 10^{-6}$  m

$E_n \sim 1,4 \cdot 10^{-46} n^2$  J (!). Zum Vergleich die mittlere thermische Energie pro Freiheitsgrad bei 1 K (!) ist  $kT \sim 10^{-23}$  J, das entspräche  $n \sim 3 \cdot 10^{11}$  und einem Abstand zwischen benachbarten Niveaus von  $\sim 8 \cdot 10^{-35}$  J. Diese feine Energiequantelung ist experimentell nicht auflösbar ...

## 2.4 Eindimensionale Potenzialstufe

Wir untersuchen die Wechselwirkung eines von links einfallenden qmT mit der rechteckigen, unendlich weit ausgedehnten Potenzialbarriere

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{für } x \leq 0 \\ U_0, & \text{für } x > 0 \end{cases}$$



In der KM würden wir folgendes Verhalten erwarten:

$E > U_0$ : Im Übergangsbereich  $x \sim 0$  reduziert sich die kinetische Energie bzw. der Impuls von

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ auf } E - U_0 = \frac{p^2}{2m}. \text{ Das klassische Teilchen wird nicht an der Potenzialstufe}$$

reflektiert.

$E < U_0$ : Das klassische Teilchen wird vollständig reflektiert, der Bereich  $x > 0$  ist klassisch nicht zugänglich.

Für ein qmT können wir die WF in den Bereichen "I" ( $x < 0$ ) und "II" ( $x > 0$ ) auf der Basis der Ergebnisse in Kap. 2.2 sofort hinschreiben:

$$\underline{x < 0}: \psi_I(x) = \underbrace{e^{ikx}}_{\text{einfallend}} + \underbrace{\rho e^{-ikx}}_{\text{reflektiert}} \text{ mit } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

$$\underline{x > 0}: \psi_{II}(x) = \begin{cases} \tau e^{iqx}, & \text{für } E > U_0 \text{ mit } \hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)} \text{ reell} \\ \tau e^{\kappa x}, & \text{für } E < U_0 \text{ mit } \hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)} \text{ reell} \end{cases}$$

An der Stelle  $x = 0$  fordern wir die Stetigkeit der WF und ihrer ersten Ableitung (endlicher Sprung des Potentials). Auf diese Weise können wir die zunächst unbekanntenen Konstanten  $\rho$  und  $\tau$  bestimmen. Der Koeffizient vor  $e^{ikx}$  kann (ohne Beschränkung der Allgemeinheit!) gleich Eins gesetzt werden.

Stetigkeit:  $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow 1 + \rho = \tau$

Stetigkeit der Ableitung:  $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow ik(1-\rho) = \begin{cases} iq\tau, & E > U_0 \\ \kappa\tau, & E < U_0 \end{cases}$ .

Nach Elimination von  $\tau$  folgt

$$\rho = \begin{cases} \frac{k-q}{k+q}, & E > U_0 \\ \frac{k-i\kappa}{k+i\kappa}, & E < U_0 \end{cases}, \text{ also } \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow \tau = 1 + \rho = \begin{cases} \frac{2k}{k+q}, & E > U_0 \\ \frac{2k}{k+i\kappa}, & E < U_0 \end{cases}.$$

Damit ist die WF (bis auf den hier unwesentlichen Normierungsfaktor) bestimmt. Zur Berechnung von Reflexion und Transmission verwenden wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (WSD) entsprechend (1.5)

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div } \underline{j} = 0 \quad \text{mit } w := \psi^* \psi \quad \text{und } \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m} \underline{\nabla} \cdot (\psi \underline{\nabla} \psi^* - \psi^* \underline{\nabla} \psi).$$

Im vorliegenden eindimensionalen und stationären Fall haben wir  $\frac{dj}{dx} = 0$ , also  $j = \text{const}$

unabhängig von  $x$  in den Bereichen "I" und "II": Für die WSD der einfallenden "Welle"

$\psi_0 = e^{ikx}$  folgt

$$j_0 = \frac{i\hbar}{2m} [e^{ikx} (-ik) e^{-ikx} - e^{-ikx} (ik) e^{ikx}] = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik) = \frac{\hbar k}{m}.$$

Analog ergibt sich die WSD der reflektierten "Welle"  $\rho e^{-ikx}$

$$j_R = \frac{i\hbar}{2m} [\rho e^{-ikx} (ik) \rho^* e^{ikx} - \rho^* e^{ikx} (-ik) \rho e^{-ikx}] = \frac{i\hbar}{2m} (2ik) \rho^* \rho = -\frac{\hbar k}{m} |\rho|^2 = -j_0 |\rho|^2$$

und für die "transmittierte Welle"  $\psi_{II}(x)$  zu

$$j_T = \begin{cases} \frac{\hbar q}{m} |\tau|^2 = \frac{q}{k} j_0 |\tau|^2, & E > U_0 \\ 0, & E < U_0 \end{cases}.$$

Wir definieren allgemein den Reflexions- und den Transmissionskoeffizienten entsprechend

$$R(E) := \frac{j_R}{j_0} \rightarrow \text{Reflexionskoeffizient} \quad \text{und} \quad T(E) := \frac{j_T}{j_0} \rightarrow \text{Transmissionskoeffizient}$$

und erhalten im Fall der hier betrachteten Potenzialstufe:

$$\underline{E < U_0}: R(E) := \frac{j_R}{j_0} = |\rho|^2 = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right|^2 = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \frac{k + i\kappa}{k - i\kappa} = 1 \quad \text{und} \quad T(E) := \frac{j_T}{j_0} = 0.$$

→ Für  $E < U_0$  wird das qmT vollständig an der Potenzialstufe reflektiert.

Trotzdem dringt das qmT in die (endlich hohe) Barriere ein, denn mit der exponentiell abklingenden WF  $\psi_{II}$  ist auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Bereich "II" zwar exponentiell fallend, aber dennoch verschieden von Null. Als Maß für die Eindringtiefe  $L$  in die Barriere bietet sich

$$L \sim \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} \rightarrow \text{Eindringtiefe}$$

an. Die Eindringtiefe ist um so größer, je stärker sich die Energie  $E$  der Barrierenhöhe  $U_0$  nähert.

$$\underline{E > U_0}: R(E) = |\rho|^2 = \left| \frac{k - q}{k + q} \right|^2 \quad \text{und} \quad T(E) := \frac{j_T}{j_0} = \frac{q}{k} |\tau|^2 = \frac{4kq}{(k + q)^2}.$$

→ Das qmT wird teilweise reflektiert (!, im Gegensatz zur KM) und transmittiert. Dabei nimmt die Transmission mit zunehmender Reflexion ab, denn es gilt

$$R(E) + T(E) = 1 \quad \text{wegen} \quad j_0 = j_R + j_T$$

für alle  $E$  als Folge der Erhaltung des Teilchenstroms (Kontinuitätsgleichung). Man erkennt sofort, dass diese Relation im vorliegenden Fall sowohl für  $E > U_0$  als auch für  $E < U_0$  erfüllt ist.

