

2.4 Eindimensionale rechteckige Potentialschwelle. Tunneleffekt

QmT können in räumliche Bereiche eindringen, in denen eine klassische Bewegung nicht möglich/verboten ist und diese u.U. überwinden. Wir demonstrieren diesen so genannten Tunneleffekt am Beispiel der rechteckigen Potentialschwelle und betrachten dazu Wechselwirkung eines qmT mit einer rechteckigen Potenzialbarriere der Breite $2a$ und der Höhe U_0

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}.$$

Dieser Potenzialverlauf entspricht dem des umgestülpten Potenzialtopfes endlicher Tiefe. Während klassische Teilchen mit Energien $E < U_0$ vollständig an den Potenzialwänden reflektiert werden, können qmT die Potenzialbarriere überwinden.

Die Lösung der stationären SG hat für $E < U_0$ die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, & -a < x < a \text{ mit „Wellenzahlen“ } \hbar k = \sqrt{2mE}, \hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}. \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & a < x \end{cases}$$

Aus den Stetigkeitsforderungen an die Wellenfunktion ergeben sich bei $x = -a$ die Anschlussbedingungen

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a}$$

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = -\kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a})$$

In Matrizen-Form lauten diese beiden Gleichungen

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k}e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k}e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \text{ oder } \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Mit Hilfe der Transfer-Matrix \hat{M} lassen sich auch die Anschlussbedingungen am Ort $x = a$ in kompakter Form

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \hat{M}(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

darstellen.

Nach einfacher Rechnung finden wir

$$\hat{M}(a) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ka} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & -e^{\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} \end{pmatrix} = \dots = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} \\ \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a - ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix}$$

und daraus

$$\hat{M}(a) \hat{M}^{-1}(-a) = \begin{pmatrix} \cosh(2\kappa a) + i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) e^{2ika} & i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) \\ -i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) & \cosh(2\kappa a) - i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) e^{-2ika} \end{pmatrix}$$

mit den Abkürzungen $\varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$ und $\eta := \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$.

Betrachten wir nun den Fall eines von links einfallenden qmT. Dann ist $G = 0$ und es folgt

$$A = \left[\cosh(2\kappa a) + i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) \right] e^{2ika} \cdot F \quad \text{sowie} \quad B = i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) \cdot F.$$

Über die Wahrscheinlichkeitsstromdichten (oder direkt über die AWD im Bereich $x > a$) erhalten wir für den Transmissionskoeffizienten den Ausdruck

$$T(E) = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \dots = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \sinh^2(2\kappa a)}, \quad E < U_0.$$

Was ändert sich im Fall $E > U_0$? Dann ist die WF auch im Intervall $-a < x < a$ oszillierend

$\psi(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}$, $-a < x < a$, mit $\hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)}$ reell. Damit ist $q = i\kappa$, also $\kappa = -iq$ und es folgt $\sinh(2\kappa a) = \sinh(-2iqa) = -i \sin(2qa)$ wegen $\sinh(iz) = i \sin z$.

$$\frac{1}{1 + \frac{\varepsilon^2}{4}} = \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2} \text{ gilt sowohl für } \varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \text{ als auch für } \varepsilon = \frac{-iq}{k} - \frac{k}{-iq}.$$

Damit ergibt sich für die **Transmissionskoeffizienten einer rechteckigen Potentialschwelle** der Breite $2a$ und der Höhe U_0 abschließend

$$T(E) = T(E; U_0, a) = \begin{cases} \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)}, & E < U_0 \\ \frac{4E(E - U_0)}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}\right)}, & E > U_0 \end{cases}$$

Fazit:

$$E < U_0$$

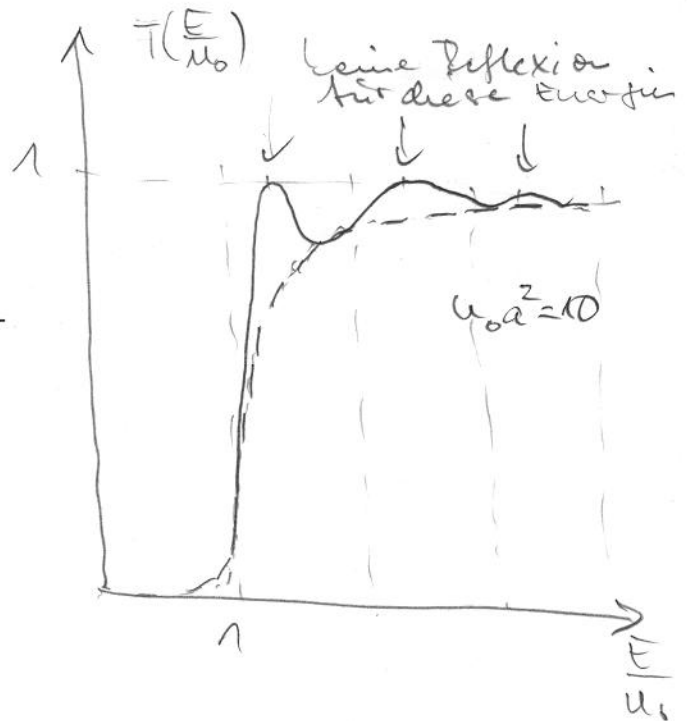
Während das klassische Teilchen vollständig an der Potentialschwelle reflektiert wird, überwindet das qmT diese mit einer Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E) = T(E; U_0, a) > 0 \rightarrow$ **Tunneleffekt**.

$$E < U_0$$

KM \rightarrow keine Reflexion

QM \rightarrow i.a. partielle Reflexion. Für bestimmte Energiewerte wird das qmT gar nicht reflektiert, nämlich wenn

$$2\kappa a = n\pi, \text{ also } E_n = \underbrace{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}}_{\substack{\text{Bindungszu-} \\ \infty \text{ tiefen Potenzial opf}}} + U_0, \quad n = 1, 2, \dots$$



Mit zunehmendem $\frac{E}{U_0}$ oszilliert $T(E)$ zwischen 1 und der gestrichelten Kurve $\frac{4E(E-U_0)}{(2E-U_0)^2}$, die für $\sin^2(2\kappa a) = 1$ folgt.

Viele Beispiele für Tunneleffekt:

- α -Zerfall (Gamov, 1928)
- kalte Emission von e^- im elektrischen Feld (s.u.)
- Tunneln zwischen zwei durch eine Isolatorschicht getrennten Halbleitern
- Tunneln von Cooper-Paaren in Supraleitern \rightarrow Josephson-Effekt
- Tunnelelektronenmikroskop
- ...

3. Quantenmechanische Erwartungswerte (qmEWW)

Aus der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) $w(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ für den Ort des qmT in V ergibt sich für die mittlere Koordinate

$$\langle x \rangle = \int_V dx x |\psi(x, t)|^2.$$

Um den mittleren Impuls des qmT berechnen zu können, benötigen wir die WD $\tilde{w}(p, t)$ dafür, dass der Impuls p zum Zeitpunkt t den Wert $p \in (p, p + dp)$ annimmt. Zur Bestimmung von $\tilde{w}(p, t)$ „entwickeln wir die (beliebige normierbare) WF $\psi(x, t)$ nach ebenen Wellen“ (\rightarrow Fourier-Integral) entsprechend

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p, t) e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad \text{Rücktransformation}$$

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t) e^{-i\frac{p}{\hbar}x}.$$

Offensichtlich ist $\phi(p, t)$ die Amplitude einer ebenen Welle mit Impuls p .

Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi(p, t)|^2 &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi^* \phi &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\phi^*(p,t)} \cdot \underbrace{\phi}_{\psi(x,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\psi(x,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1. \end{aligned}$$

Die Relation $\int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi(p, t)|^2 = 1$ legt nahe, $|\phi(p, t)|^2 dp$ als die Wahrscheinlichkeit dafür aufzufassen, dass das qmT zum Zeitpunkt $t \in (t, t + dt)$ den Impuls $p \in (p, p + dp)$ besitzt. Damit ergibt sich für den Erwartungswert/Mittelwert des Impulses der Ausdruck

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\phi(p, t)|^2 .$$

Kann man $\langle p \rangle$ durch die "ursprüngliche" WF $\psi(x)$ ausdrücken (wir unterdrücken die Variable t im Folgenden)?

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\phi(p, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) p \phi^*(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) p \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\phi^*(p)} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp p \phi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\psi(x)} \end{aligned}$$

Infolgedessen gilt

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) \quad \text{mit} \quad \underline{\hat{p} := -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \rightarrow \text{Impulsoperator } (\hat{p}_x) \text{ (x-Komponente)}$$

Analog finden wir

$$\langle p^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p^n |\phi(p, t)|^2 = \dots = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \hat{p}^n \psi(x)$$

und wenn wir voraussetzen, dass $f(p)$ in eine Taylor-Reihe entwickelbar ist

$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp f(p) |\phi(p, t)|^2 = \dots = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) f(\hat{p}) \psi(x) .$$

Im dreidimensionalen Fall haben wir zu ersetzen: $dx \rightarrow d^3r$, $p \rightarrow -i\hbar \underline{\nabla} =: \hat{\underline{p}}$.

Allgemein erhalten wir für den quantenmechanischen Erwartungswert (qmEWW) einer Observablen (klassischen Phasenraumvariablen) $Q(\underline{p}, \underline{r}, t)$ im Zustand $\psi(\underline{r}, t)$ den Ausdruck

$$\underline{\langle Q \rangle_{|\psi\rangle}} = \int d^3r \psi^*(\underline{r}, t) \hat{Q} \psi(\underline{r}, t) \quad \text{mit} \quad \underline{\hat{Q}} = Q(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla}, t) \quad \text{"Ortsdarstellung"}$$

Wir halten fest: $\psi(\underline{r}, t)$ und $\phi(\underline{p}, t)$ enthalten die gleichen (vollständigen) Informationen (über den Zustand des qmT/qm Systems) und können als unterschiedliche Darstellungen der WF aufgefasst werden.

	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
WF	$\psi(\underline{r}, t)$	$\phi(\underline{p}, t)$
Ortsoperator	\underline{r}	$i\hbar \underline{\nabla}_p$ ¹⁾
Impulsoperator	$-i\hbar \underline{\nabla}$	\underline{p}
Observable	$\hat{Q} = Q(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla})$	$\hat{Q} = Q(\underline{p}, i\hbar \underline{\nabla})$
Bewegungsglg.	Schrödinger-Glg.	SG für $\phi(\underline{p}, t)$ (FT der SG für $\psi(\underline{r}, t)$) ²⁾

¹⁾ selbstständig analog zur Vorgehensweise oben herleiten

²⁾ Übung: Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung

- **Kompakte Schreibweise der SG**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\underline{r}, t) \quad \text{mit} \quad \hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\underline{r}, t) = \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} + U(\underline{r}, t)$$

Hamilton-Funktion der KM $H(\underline{p}, \underline{r}, t) \rightarrow$ Hamilton-Operator $\hat{H} = H(\underline{r}, -i\hbar \nabla, t)$

stationäre SG: $\hat{H} \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r}) \rightarrow$ Eigenwertgleichung für Hamilton-Operator \hat{H}

Eigenfunktionen (EF) von $\hat{H} \rightarrow$ WF

Eigenwerte (EW) von $\hat{H} \rightarrow$ Energie-Niveaus, Energiespektrum

FAZIT: Bei Bewegung eines qmT im zeitunabhängigen Potenzial $U(\underline{r})$ sind die die möglichen/gemessenen Energien die EW des \hat{H} , die WF die entsprechenden EF von \hat{H} .

Unser Rezept war (\rightarrow "**Korrespondenzprinzip**"): Ordne einer Observablen $Q(\underline{p}, \underline{r})$ den Operator $\hat{Q} = Q(\underline{r}, -i\hbar \nabla)$ und löse das EWP $\hat{Q} \psi_n = q_n \psi_n$.

- Impuls $\hat{\underline{p}} = -i\hbar \nabla$, $\hat{\underline{p}} \psi(\underline{r}) = \hbar \underline{k} \psi(\underline{r})$ mit EF $\psi(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\underline{r}}$
- analog für $\hat{\underline{L}}, \hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{T}, \hat{H}$ usw.