

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

2.1 Eindimensionale (1D) Bewegung im zeitunabhängigen Kraftfeld $U(x)$

Die Wellenfunktion (WF) hat bei 1D Bewegung in $U(x)$ die Form

$$\tilde{\psi}(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad \text{wobei } \psi(x) \text{ Lösung von } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.1)$$

ist (\rightarrow stationäre Schrödinger-Gleichung) und E die der WF $\psi(x)$ entsprechende Energie des Teilchens der Masse m ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) und die quantenmechanischen Erwartungswerte (s.u.) sind zeitunabhängig

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

(\rightarrow stationäre Zustände).

Physikalisch relevant sind nur die normierbaren, eindeutigen (wenigstens $\psi \psi^*$ sei eindeutig), stetigen und stetig differenzierbaren Lösungen von (2.1).

- Stetigkeit der Wellenfunktion

Die Stetigkeit der WF hängt mit der Stetigkeit von $U(x)$ zusammen:

(i) Ist $U(x)$ stetig in $x = a$, dann ist wegen (2.1) $\psi''(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} [E - U(x)] \psi''(x)$ auch $\psi''(x)$

dort stetig. Damit ist $\psi(x)$ stetig differenzierbar am Ort a .

(ii) Besitzt $U(x)$ einen endlichen Sprung bei $x = a$, gilt das gleiche für $\psi''(x)$. Also sind

$$\psi'(x) \text{ und } \psi(x) \text{ in } x = a \text{ stetig, d.h., } \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(a - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(a + \varepsilon), \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi' \Big|_{a-\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi' \Big|_{a+\varepsilon}.$$

Bezeichnen wir den Bereich links (rechts) von a mit I (II), können wir verkürzt schreiben

$$\underline{\psi_I(a) = \psi_{II}(a), \quad \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)} \quad (2.2)$$

Beweis durch Annahme des Gegenteils:

Hätte $\psi(x)$ einen endlichen Sprung bei $x = a$, also $\psi(x) \sim \theta(x - a)$, wäre $\psi''(x) \sim \delta'(x - a)$.

Hätte $\psi'(x)$ einen endlichen Sprung bei $x = a$, also $\psi'(x) \sim \theta(x - a)$, wäre $\psi''(x) \sim \delta(x - a)$.

Beides stünde im Widerspruch zu $\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi(x)$, da einem unendlichen

Sprung im Punkt a auf der linken ein endlicher Sprung auf der rechten Seite der Gleichung gegenüberstünde.

- Reelle Wellenfunktionen

Da $U(x)$ reell, ist mit $\psi(x)$ auch $\psi^*(x)$ Lösung von (2.1). Da Gleichung (2.1) linear ist, sind Real- und Imaginärteil von $\psi(x)$ sowie die beiden Kombinationen $\psi(x) + \psi^*(x) = 2 \operatorname{Re}[\psi(x)]$ und $i[\psi(x) - \psi^*(x)] = -2i \operatorname{Im}[\psi(x)]$ ebenfalls Lösungen der stationären SG (2.1).

Damit können wir uns im betrachteten Fall von vorn herein auf reelle Lösungen beschränken.

- Keine Entartung der Wellenfunktion

Seien ψ_1 und ψ_2 zwei unterschiedliche Lösungen von (2.1) zum selben Eigenwert E . Dann gilt (Punkte mit $\psi_{1/2} = 0$ ausgenommen)

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

Für $x \rightarrow \pm\infty$ strebt die WF oder ihre Ableitung gegen Null, deshalb ist die Integrationskonstante auf der rechten Seite Null. Es folgt

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \quad \text{sowie über} \quad \ln \psi_1 = \ln \psi_2 + \ln C \quad \text{schließlich} \quad \psi_1 = C \psi_2.$$

Zwei Wellenfunktionen, die sich nur durch einen konstanten Faktor unterscheiden, sind aber identisch.

Die obige Annahme erweist sich somit als falsch: Bei der 1D Bewegung in $U(x)$ existiert zu jedem Wert der Energie genau eine Wellenfunktion $\psi(x)$. Man sagt, bei Bewegung in $U(x)$ sind alle Energieniveaus des diskreten Spektrums nicht entartet.

- Symmetrie der Wellenfunktion

Ist $U(x)$ symmetrisch, $U(x) = U(-x)$, dann ist mit $\psi(x)$ auch $\psi(-x)$ Lösung von (2.1) zum Energiewert E , denn

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

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

FAZIT: Bei Bewegung in $U(x)$ sind die Wellenfunktionen $\psi(x)$ reell und im Fall von $U(x) = U(-x)$ gerade oder ungerade. Die Energieniveaus (der gebundenen Bewegung) sind nicht entartet.

2.2 Eindimensionale Bewegung im stückweise konstanten Potenzial

Motivation: Approximation ortsabhängiger durch stückweise konstante Kraftfelder.

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

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 der Bewegung

λ imaginär \rightarrow setze $\lambda = ik, k := \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$ reell $\psi(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{nach rechts}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\text{nach links}}$

Die Wellenfunktion ist die Überlagerung einer nach rechts und einer nach links laufenden ebenen Welle. Es handelt sich um de Broglie-Wellen freier Teilchen der Masse m mit Energie $E - U_0$ und Impulsen $p = \hbar k = \pm \sqrt{2m(E - U_0)}$. Wie in der klassischen Mechanik gilt

$$\frac{p^2}{2m} = E - U_0 .$$

Beachte: Oszillierende Wellenfunktionen im klassisch erlaubten Bereich der Bewegung.

B: $E < U_0 \rightarrow$ klassisch verbotener Bereich der Bewegung

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

Beachte: Endliche AWD im klassisch verbotenen Bereich! Teilchen dringen in diese Bereiche ein, und können Potentialbarrieren endlicher Breite überwinden.

Ist der klassisch verbotene Bereich $x_0 < x < \infty$, dann folgt aus der Normierungsbedingung

$$A = 0, \text{ also } \psi(x) = B e^{-\lambda x}, \text{ usw.}$$

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

Fazit stückweise konstante Potenziale: 1D stationäre Schrödinger-Gleichung für $\psi(x)$:

$$\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U_0 \psi(x) = E \psi(x)}$$

$$\underline{\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \hbar k = \sqrt{2m(E - U_0)} \rightarrow \text{oszillierend} \leftrightarrow \text{klassisch erlaubt, } E > U_0 \text{ (2.3)}}$$

$$\underline{\psi(x) = a e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}, \hbar \lambda = \sqrt{2m(U_0 - E)} \rightarrow \text{exponentiell} \leftrightarrow \text{klassisch verboten, } E < U_0}$$

wobei k, λ reell und $\frac{p^2}{2m} = E - U_0$ (wie in KM).

Beachte:

Die Umkehrpunkte der klassischen Bewegung sind die Wendepunkte der Wellenfunktion.

2.3 Eindimensionale Bewegung im Potenzialtopf. Diskrete Energieniveaus.

A: Potenzialtopf mit un hohen Wänden, Breite $2a$: $U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases}$.

$|x| \geq a$, außerhalb des Topfes $E < U_0$, also $\psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}$, $\lambda = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \rightarrow \infty$.

Unter Berücksichtigung der Forderung nach Normierbarkeit folgt $\psi(x) = 0$.

Beispielsweise muss die Konstante A für $x > a$ Null sein. Die Eindringtiefe von $\psi(x) = B e^{-\lambda x}$ in den Bereich $x > a$ ist $\sim \lambda^{-1}$ (s.u.), strebt also gegen Null.

Zum gleichen Ergebnis kommen wir, wenn wir in der Wellenfunktionen für den endlich tiefen Potentialtopf den Grenzübergang $U_0 \rightarrow \infty$ ausführen (Übungsblatt).

$|x| \geq a$, innerhalb des Topfes $E > U_0 = 0$, also

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}.$$

Da $U(x) = U(-x)$, ist $\psi(x)$ entweder eine gerade oder eine ungerade Funktion:

Gerade WF: Aus $\psi(x) = \psi(-x)$ folgt $A = B$ und $\psi(x) = 2A \cos(kx)$, Stetigkeit bei $x = \pm a$,

Glg. (2.2), ergibt $\cos(ka) = 0$, also $k = \frac{n\pi}{2a}$, $n = 1, 3, 5, \dots \rightarrow$ diskrete Werte!

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

$x = \pm a$ ergibt $\sin(ka) = 0$, also $k = \frac{n\pi}{2a}$, $n = 2, 4, 6, \dots \rightarrow$ diskrete Werte!

Aus den diskreten Werten für k , $k \rightarrow k_n$, resultieren

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

Eine Bewegung im unendlich tiefen Potenzialtopf ist aus Sicht der Quantenmechanik nur für diskrete Energieniveaus möglich. n wird Quantenzahl genannt.

Normierung der WF: Unter Verwendung von $\int_{-a}^a dx \cos^2(k_n x) = \int_{-a}^a dx \sin^2(k_n x) = a$ ergibt sich

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 $C = \frac{1}{\sqrt{a}}$, denn

$$I := \int_{-a}^a dx \cos^2(k_n x) = \int_{-a}^a \frac{1}{k_n} d[\sin(k_n x)] \cos(k_n x) = \underbrace{\sin(k_n x) \cos(k_n x)}_0 \Big|_{-a}^a -$$

$$-\frac{1}{k_n} \int_{-a}^a dx \sin(k_n x) [-k_n \sin(k_n x)] = \int_{-a}^a dx \sin^2(k_n x) = \int_{-a}^a dx [1 - \cos^2(k_n x)] \rightarrow 2I = \int_{-a}^a dx = 2a.$$

Fazit: Für die Bewegung im 1D, unendlich tiefen Potenzialtopf gilt

(i) diskretes Energiespektrum $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, n = 1, 2, 3, \dots$ (2.4 a)

Der Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus wächst proportional zu n. Je breiter der Potenzialtopf, desto enger liegen benachbarte Energieniveaus; für $a \rightarrow \infty$ wird das Energiespektrum kontinuierlich.

(ii) Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ 0, & \text{für } |x| > a \end{cases}$ für $|x| < a$ (2.4 b)

Die $\psi_n(x)$ sind gerade oder ungerade reelle Funktionen mit $n - 1$ Knoten (Nullstellen).

(iii) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\psi_n(x) \psi_n^*(x) = \begin{cases} \frac{1}{a} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ 0, & \text{für } |x| > a \end{cases}$$
 (2.4)

c)

besitzt n lokale Maxima innerhalb des Bereiches $-a < x < a$.

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 des Potenzialtopfes ($x = 0$)

- $n = 2 \rightarrow$ erster angeregter Zustand

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

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

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 führen auf die gleichen Schlussfolgerungen (i) – (iii) wie 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 $\psi(\pm a) = 0$). \rightarrow Übungsblatt: Stellen Sie die Lage der Energieniveaus, die Wellenfunktionen und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten für $n = 1, 2$ und 3 grafisch dar.

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 dem

Grundzustand und dem erstem angeregten Zustand ist $E_2 - E_1 \sim 4,5 \cdot 10^{-18}$ J ~ 28 eV. Die

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

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

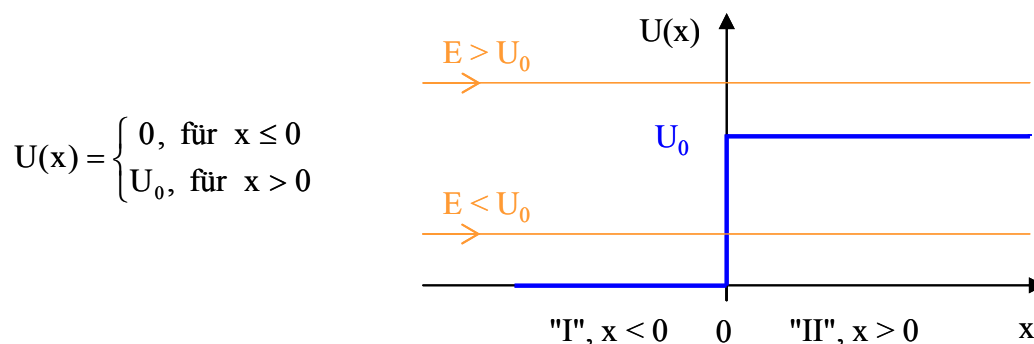
Wir finden $E_2 - E_1 \sim 5 \cdot 10^{-12} \text{ J} \sim 28 \text{ MeV}$.

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

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

2.4 Streuung an einer eindimensionalen Potenzialstufe

Wir untersuchen die Wechselwirkung eines von links einfallenden Teilchens mit der rechteckigen, unendlich weit ausgedehnten Potenzialstufe



A: Aus Sicht der klassischen Mechanik erwarten wir folgendes Verhalten:

$E > U_0$: Im Übergangsbereich $x \sim 0$ reduzieren sich Impuls und kinetische Energie von

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ auf } E - U_0 = \frac{p^2}{2m}$$

aber nicht reflektiert.

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

B: Aus Sicht der Quantenmechanik können wir die Wellenfunktion in den Bereichen "I" ($x < 0$) und "II" ($x > 0$) auf der Basis der Ergebnisse aus Kap. 2.2 sofort aufschreiben:

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

(Superposition einer links einfallenden und einer nach rechts reflektierten Welle).

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

(nach rechts laufende transmittierte Welle)

An der Stelle $x = 0$ fordern wir die Stetigkeit der WF und ihrer ersten Ableitung (endlicher Sprung des Potentials, (2.2)). Auf diese Weise bestimmen wir die zunächst unbekanntenen Konstanten ρ und τ .

Der Koeffizient vor dem Term e^{ikx} kann wegen der Normierung der gesamten Wellenfunktion ohne Beschränkung der Allgemeinheit Eins gesetzt werden.

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

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

$$\text{Nach Elimination von } \tau \text{ folgt } \rho = \begin{cases} \frac{k - q}{k + q}, & E > U_0 \\ \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, & E < U_0 \end{cases} \quad \text{und} \quad \tau = 1 + \rho = \begin{cases} \frac{2k}{k + q}, & E > U_0 \\ \frac{2k}{k + i\kappa}, & E < U_0 \end{cases}.$$

Damit ist die WF (bis auf den hier unwesentlichen Normierungsfaktor) eindeutig bestimmt.

Reflexion und Transmission berechnen wir mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsstromdichte (WSD) entsprechend (1.5)

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

Im vorliegenden eindimensionalen und stationären Fall haben wir $\frac{d j}{dx} = 0$. Also ist j in den Bereichen "I" und "II" unabhängig von x , $j = \text{const.}$

Für die WSD j_0 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 für die WSD j_R der reflektierten "Welle" ρe^{-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 der "transmittierten Welle" $\psi_{II}(x)$

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

Wir definieren **Reflexions-** und **Transmissionskoeffizient** entsprechend

$$\text{Def.: } \underline{R(E)} := \frac{j_R}{j_0}, \quad \underline{T(E)} := \frac{j_T}{j_0}, \quad \text{wobei } R(E) + T(E) = 1. \quad (2.5)$$

Die letzte Relation folgt aus der statistischen Interpretation der Wellenfunktion bzw. der sich daraus ergebenden Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$j_0 = j_R + j_T, \text{ unabhängig von } E.$$

Aus (2.5) erhalten wir im Fall der Potenzialstufe für $E < U_0$ und $E > U_0$ aus Sicht der Quantenmechanik die Ergebnisse:

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

Das Teilchen wird vollständig an der (unendlich ausgedehnten) Potenzialstufe reflektiert.

Trotzdem dringt es in die (endlich hohe) Barriere ein, denn mit der exponentiell abklingenden

WF $\psi_{II}(x)$ fällt zwar die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Bereich "II" exponentiell ab, ist aber dennoch verschieden von Null.

Als Maß für die Eindringtiefe, L , in die Barriere bietet sich die Eindringtiefe

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

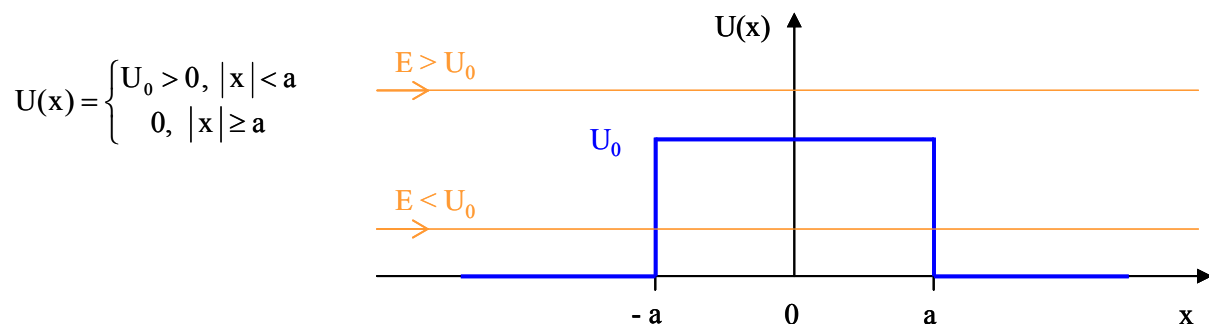
an. L ist um so größer, je stärker sich die Energie E der Barrierenhöhe U_0 nähert.

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

Das von links einfallende Teilchen bewegt sich rechts von der Potenzialstufe weiter, wird aber im Gegensatz zur klassischen Mechanik auch reflektiert. Die Transmission nimmt mit zunehmender Reflexion ab, (2.5). Sie können leicht überprüfen, dass die Relation $R(E) + T(E) = 1$ sowohl für $E > U_0$ als auch für $E < U_0$ erfüllt ist.

2.5 Eindimensionale rechteckige Potenzialbarriere. Tunneleffekt

Quantenmechanisch können Teilchen in räumliche Bereiche eindringen, in denen eine klassische Bewegung nicht möglich ist und deshalb eine Potentialbarriere überwinden. Wir demonstrieren diesen sogenannten Tunneleffekt am Beispiel einer rechteckigen Potenzialbarriere der Breite $2a$ und der Höhe U_0



Dieser Potenzialverlauf entspricht dem des umgestülpten Potenzialtopfes endlicher Tiefe. Während die Teilchen klassisch mit Energien $E < U_0$ vollständig an den Potenzialwänden

reflektiert werden, können sie quantenmechanisch betrachtet die Potenzialbarriere überwinden.

Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung hat für $E < U_0$ die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, & -a < x < a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & a < x \end{cases}$$

mit „Wellenzahlen“ $\hbar k = \sqrt{2mE}$, $\hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}$.

Aus den Stetigkeitsforderungen an $\psi(x)$ ergeben sich bei $x = -a$ die Anschlussbedingungen

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

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

oder in Matrix-Form

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k}e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k}e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}.$$

Wir definieren nun die sogenannte **Transfer-Matrix** $\hat{M}(a)$ über $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$

Mit Hilfe von \hat{M} lassen sich auch die Anschlussbedingungen am Ort $x = a$ kompakt formulieren: $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \hat{M}(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$ woraus $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \hat{M}^{-1}(-a) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$ folgt.

Nach einiger Rechnung finden wir aus

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

Schließlich

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

Die beiden neu eingeführten Abkürzungen sind $\varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$ und $\eta := \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$.

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

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

Daraus 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

$$\psi(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}, \quad -a < x < a \quad \text{mit} \quad \hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)} \quad \text{reell.}$$

Also gilt $q = i\kappa$, d.h. $\kappa = -iq$ und es folgt $\sinh(2\kappa a) = \sinh(-2iq a) = -i \sin(2qa)$ wegen $\sinh(iz) = i \sin z$.

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

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

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

Nebenrechnungen (□▢▣▤▥):

$$\square \quad \sinh z = \frac{1}{2}(e^z - e^{-z}), \quad \cosh z = \frac{1}{2}(e^z + e^{-z})$$

▢ Ersetzt man κ durch $-iq$ mit $\hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)}$ reell, ergibt sich aus

$$\varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} = \frac{-iq}{k} - \frac{k}{-iq} = -i \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \quad \text{wieder } 1 + \frac{\varepsilon^2}{4} = \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)}.$$

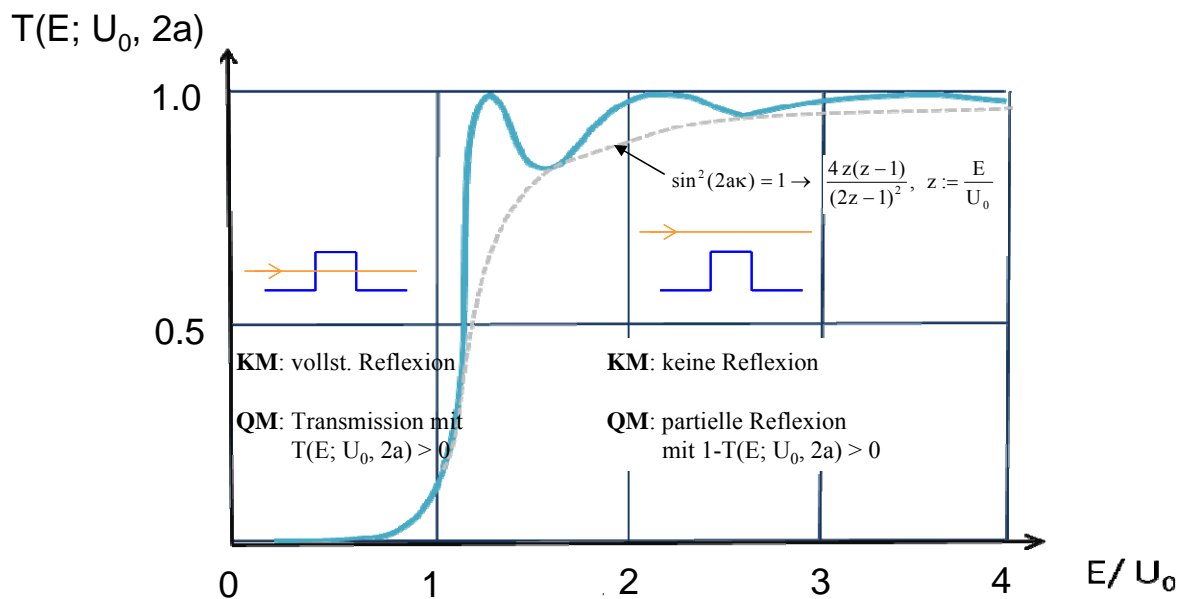
Die Vorzeichenumkehr im Zähler von $T(E)$ resultiert aus $[\sinh(-iz)]^2 = (-\sin z)^2 = \underset{\uparrow}{\sin^2 z}$.

▣

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon^2}{4}} &= \frac{4}{4 + \varepsilon^2} = \frac{4}{4 + \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)^2} = \frac{4}{4 + \frac{\kappa^2}{k^2} - 2 + \frac{k^2}{\kappa^2}} = \frac{4}{2 + \frac{U_0 - E}{E} + \frac{E}{U_0 - E}} = \\ &= \frac{4E(U_0 - E)}{2E(U_0 - E) + (U_0 - E)^2 + E^2} = \frac{4E(U_0 - E)}{2EU_0 - 2E^2 + U_0^2 - 2U_0E + E^2 + E^2} = \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2} \end{aligned}$$

▤ $\sinh(-2iqa) = \underset{\uparrow}{-i} \sin(2qa)$ bringt den Vorzeichenwechsel vor $\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}\right)$!

Fazit:



$$\underline{E < U_0}$$

Während das Teilchen klassisch vollständig an der Potentialschwelle reflektiert wird, kann es sie aus quantenmechanischer Sicht mit einer Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E; U_0, 2a) > 0$ überwinden → **Tunneleffekt**.

$$\underline{E > U_0}$$

KM → keine Reflexion

QM → i.a. partielle Reflexion. Für bestimmte Energiewerte wird das Teilchen aber gar nicht

reflektiert, wenn nämlich $2\kappa a = n\pi$, also $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} + U_0$, $n = 1, 2, \dots$ ist. Das sind genau

die Bindungsenergien im unendlich tiefen Potentialtopf dessen Boden bei U_0 liegt

(Interpretation?).

Der Transmissionskoeffizient T oszilliert zwischen 1 und der in der Abbildung gestrichelten

Kurve $\frac{4E(E-U_0)}{(2E-U_0)^2}$, die sich für $\sin^2(2\kappa a) = 1$ ergibt (Quelle: Messiah, Abb. 3.7, S. 94).

Einige wenige Anwendungsbeispiele für den Tunneleffekt:

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