

4 Eindimensionale Systeme

Im Folgenden werden die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung für eindimensionale Systeme untersucht. Diese liefern nicht nur interessante Modellsysteme, mit deren Hilfe grundlegende quantenmechanische Phänomene studiert und verstanden werden können; viele physikalische Systeme sind aufgrund von Symmetrien praktisch eindimensional.

Wir betrachten also die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung (3.86):

$$E \psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_E(x) + V(x) \psi_E(x) \quad (4.1)$$

mit $\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$. Hier und im Folgenden lassen wir den Stützpunkt der Koordinate x weg, da wir rein im Ortsraum arbeiten werden und somit kein Ortsoperator x mehr auftaucht.

Mit der Abkürzung

$$k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \quad (4.2)$$

folgt die kompakte Form

$$\partial_x^2 \Psi_E(x) + k^2(x) \Psi_E(x) = 0. \quad (4.3)$$

Eine explizite Lösung lässt sich natürlich nur nach Vorgabe eines Potentials $V(x)$ konstruieren. Im Folgenden seien aber einige allgemeine Eigenschaften der Lösungen diskutiert

4.1 Eigenschaften der stationären Schrödinger-Gleichung

Weil H hermitisch ist, muss im Ortsraum $V(x)$ reell sein. Wenn $\Psi_E(x)$ nun eine komplexe Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, dann sind Real- und Imaginärteil jeweils separat Lösungen

der Schrödinger-Gleichung. Wir können uns also im Folgenden auf rein reelle Lösungen beschränken.

Nicht alle Lösungen von (4.1) oder (4.3) sind physikalisch akzeptabel. Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik fordert, dass

$\Psi_E(x)$ normierbar ist, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_E(x)|^2 < \infty; \quad (4.4)$$

$\Psi_E(x)$ muss also zu den quadrat integrierbaren Funktionen gehören (mathematisch: $\Psi_E(x) \in L_2(\mathbb{R})$).

Mehr noch, da $|\Psi_E(x)|^2 \Delta x$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort x im Intervall Δx angibt, darf $\Psi_E(x)$ nicht singulär sein.

Unter der Annahme, dass $V(x)$ nur endliche Diskontinuitäten ("Stufen") vorweist, aber ansonsten stetig ist, folgt, dass $\Psi_E(x)$ und $\partial_x \Psi_E(x)$ überall stetig sind, denn:

Sei $\psi_E(x)$ stetig bis auf endliche Diskontinuitäten.

Dann ist die zweite Ableitung

$$\partial_x^2 \psi_E(x) = -k^2(x) \psi_E(x) \quad (4.5)$$

integrierbar und $\partial_x \psi_E(x)$ demnach stetig. $\partial_x \psi_E$ ist folglich ebenfalls integrierbar und $\psi_E(x)$ folglich differenzierbar (die Annahme ist also selbst-konsistent).

Die Differenzierbarkeit von $\psi_E(x)$ ist wichtig, wenn Teillösungen im Intervallen $I \subset \mathbb{R}$ aneinandergelängt werden sollen, um auf \mathbb{R} eine Gesamtlösung zu erhalten.

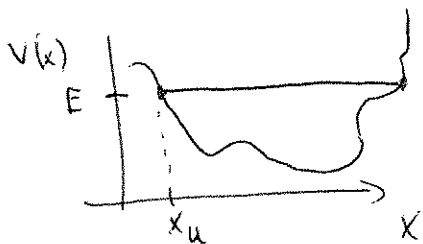
Hat $V(x)$ unendliche Diskontinuitäten (unendlich hohe Potentialwände), ist nur noch $\psi_E(x)$ überall stetig und $\partial_x \psi_E(x)$ hat endliche Diskontinuitäten.

Die Lösungen haben unterschiedliche Eigenschaften, je nachdem, ob

$$E > V(x) \Rightarrow k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) > 0, \quad (4.6a)$$

$$\text{oder } E < V(x) \Rightarrow k^2(x) < 0. \quad (4.6b)$$

In der klassischen Mechanik kann ein Teilchen in einem Potential $V(x)$ nur $E \geq V(x)$ haben, d.h. es



kann sich nur bei x -Werten aufhalten, wo seine Gesamtenergie $E \geq V(x)$ ist. Die

Punkte x_a mit $E = V(x_a)$ heißen klassische Umkehrpunkte.

Betrachten wir nun quantenmechanisch den klassisch erlaubten Bereich

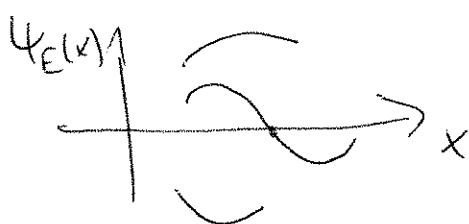
$$E > V(x) \iff k^2(x) > 0,$$

dann haben $\partial_x^2 \psi_E(x)$ und $\psi_E(x)$ wegen

$$\partial_x^2 \psi_E(x) = -k^2(x) \psi_E(x) \quad (4.7)$$

immer entgegengesetztes Vorzeichen, d.h. die Wellenfunktion ist im klassisch erlaubten Bereich immer

zur x -Achse gekrümmt, Nullstellen sind somit



Wendepunkte, so dass

Wellenfunktionen im klassisch

erlaubten oszillatorisch sind!

Im einfacheren Fall $V(x) = V = \text{const.}$ folgt für

$$E > V: \quad \Psi_E(x) = \alpha_+ e^{ikx} + \alpha_- e^{-ikx} \quad (4.8)$$

mit durch die Randbedingungen festzulegenden Konstanten α_+ und α_-

An den klassischen Umkehrpunkten x_u mit $E = V(x_u)$

wo $k^2 = 0$ hat $\Psi_E(x_u)$ wegen $\partial_x^2 \Psi_E(x_u) = 0$

einen Wendepunkt (der nicht auf der x -Achse liegen muss)

Im klassisch verbotenen Bereich

$$E < V(x) \quad \Leftrightarrow \quad k^2(x) < 0$$

Gibt es im der QM keinen Grund, warum $\Psi_E(x)$

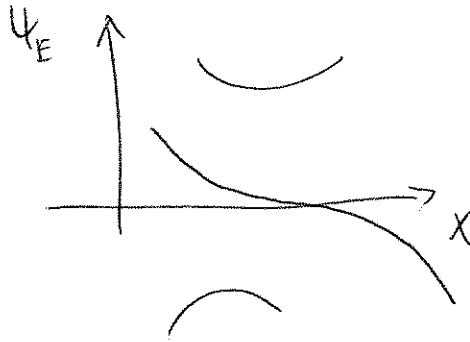
immer verschwinden muss, d.h. ein QM Teilchen

kann auch dort endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit

haben. Wegen (4.7) haben $\Psi_E(x)$ und

$\partial_x^2 \Psi_E(x)$ im klassisch Verbotenen gleiches Vorzeichen,

die Lösungen sind also von der x -Achse weg-
gekrümmmt:



Diese Eigenschaft zusammen mit der Normierbar-
keitsforderung führt zu starken Einschränkungen an
die Lösung. Z.B. für $V(x) = V = \text{const}$ für $x > x_0$
folgt für $E < V$ die Lösung

$$\psi_E(x) = \beta_+ e^{\kappa x} + \beta_- e^{-\kappa x}, \quad x > x_0 \quad (4.9)$$

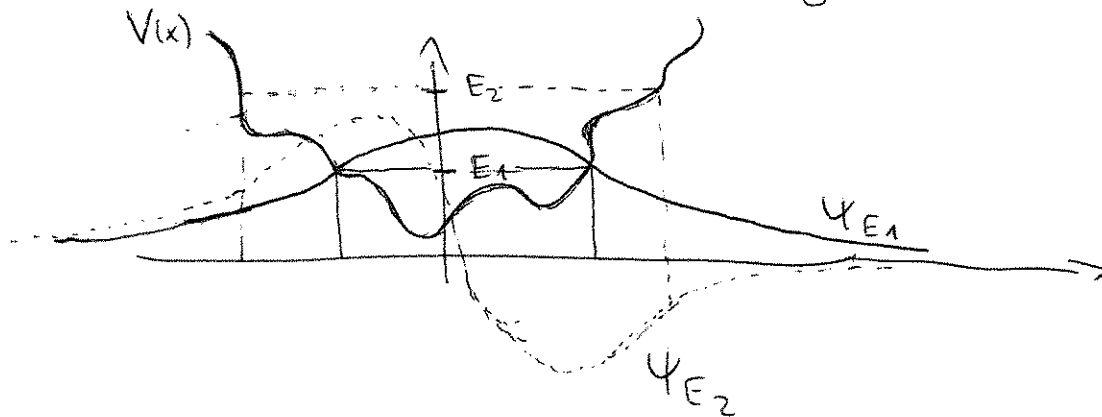
mit $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E)}$, $\kappa^2 \equiv -k^2$.

Normierbarkeit erzwingt nun $\beta_+ = 0$, so dass
 $\psi_E(x)$ im klassisch verbotenen exponentiell
abfallen muss.

Für typische Potentialprobleme mit der Eigenschaft

$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) \rightarrow \infty$ haben wir somit schon einen

qualitativen Eindruck von möglichen Wellenfunktionen:



4.2 Knotensatz

Obige Betrachtungen lassen sich u.a. mit dem Knotensatz quantitativ fassen. Dazu definieren wir die Wronski-Determinante für zwei Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung gemäß:

$$W(\psi_{E_1}, \psi_{E_2}) = \psi_{E_1} \psi'_{E_2} - \psi'_{E_1} \psi_{E_2}, \quad (4.10)$$

wobei der Strich die Ortsableitung bedeutet, $\psi'_E = \partial_x \psi_E(x)$.

$\psi_{E_{1,2}}(x)$ erfüllen die Schrödinger-Gleichung

$$E_{1,2} \psi_{E_{1,2}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''_{E_{1,2}}(x) + V(x) \psi_{E_{1,2}}(x). \quad (4.11)$$

Nun gilt:

$$\begin{aligned} \underline{W^i} &= \cancel{\psi'_{E_1}} \psi'_{E_2} + \psi_{E_1} \psi''_{E_2} - \psi''_{E_1} \psi_{E_2} - \cancel{\psi'_{E_1}} \psi'_{E_2} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \psi_{E_1} (V(x) - E_2) \psi_{E_2} - \frac{2m}{\hbar^2} \psi_{E_1} (V(x) - E_1) \psi_{E_2} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2) \psi_{E_1} \psi_{E_2} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Sei man $E_1 < E_2$ und x_1 und x_2 zwei benachbarte Nullstellen der Lösung ψ_{E_1} mit $\psi_{E_1}(x_1 < x < x_2) > 0$.



Die Integration der Wronski-Determinante' liefert

$$\int_{x_1}^{x_2} dx W'(x) = W \Big|_{x_1}^{x_2} = -\psi_{E_1}' \psi_{E_2} \Big|_{x_1}^{x_2} \stackrel{(4.12)}{=} \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2) \int_{x_1}^{x_2} dx \psi_{E_1} \psi_{E_2}$$

$$\hookrightarrow = \psi_{E_1}'(x_1) \psi_{E_2}(x_1) - \psi_{E_1}'(x_2) \psi_{E_2}(x_2)$$

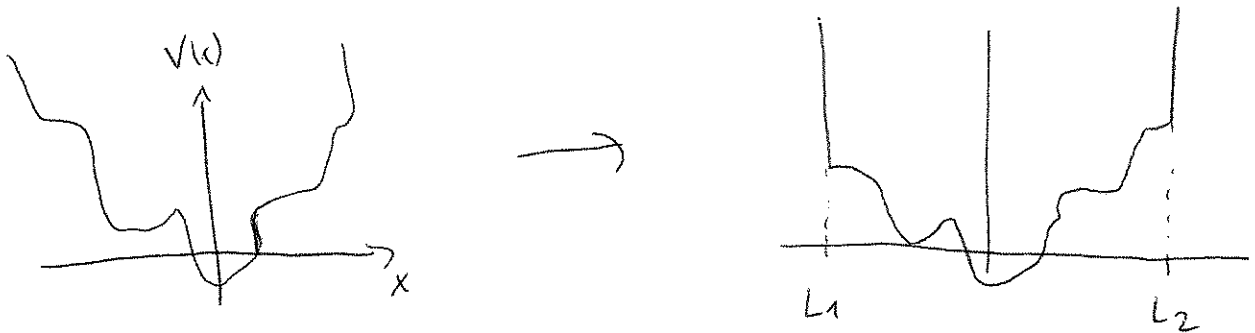
Für die betrachtete Lösung gilt (unter Ausschluss von $\psi_{E_1}'(x_{1,2}) = 0$, siehe unten):

$$\underbrace{\psi_{E_1}'(x_1)}_{>0} \psi_{E_2}(x_1) - \underbrace{\psi_{E_1}'(x_2)}_{>0} \psi_{E_2}(x_2) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_1}^{x_2} dx \underbrace{(E_1 - E_2)}_{<0} \psi_{E_1} \psi_{E_2}$$

(4.13)

Diese Gleichung wäre also nicht zu erfüllen, wenn $\psi_{E_2}(x)$ im Intervall $[x_1, x_2]$ entweder nur positiv oder nur negativ wäre. D.h. ψ_{E_2} muss zwischen x_1 und x_2 eine Nullstelle ("Knoten") haben. Dies gilt für jede Lösung mit $E_2 > E_1$.

Der Einfachheit halber betrachten wir für die folgenden Überlegungen ein Potential mit beliebiger Form (ohne Singularitäten) zwischen L_1 und L_2 aber unendlich hohen Wänden bei L_1 und L_2 . Dies kann als Idealisierung von allgemeineren Potentialen mit $V(|x| \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ verstanden werden:



Dies zwingt die Wellenfunktion $\Psi_E(L_1) = \Psi_E(L_2) = 0$ auf Null, d.h. die Schrödingers-Gleichung ist ein Randwertproblem mit Dirichlet-Randbedingungen

$$E \Psi_E(x) = H \Psi_E(x) \quad , \quad \Psi_E(L_1) = \Psi_E(L_2) = 0 \quad (4.14)$$

Partielle Ableitung nach E liefert:

$$H \phi = \Psi_E + E \phi \quad \text{mit} \quad \phi(x) = \frac{\partial \Psi_E(x)}{\partial E} \quad (4.15)$$

Die Ableitung der Wronski-Determinante von ϕ und Ψ_E nach

$$x \quad \text{liefert wegen (4.15):} \quad \Psi_E + E \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' + V \phi$$

$$\Rightarrow \phi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (\Psi_E + (E - V) \phi)$$

$$\begin{aligned}
 W'(\varphi, \psi_E) &= (\psi_E \varphi' - \psi_E' \varphi)' = \psi_E \varphi'' - \psi_E'' \varphi \\
 &= -\frac{2m}{\hbar^2} (\psi_E^2 + \cancel{(E-V)\psi_E}) + \frac{2m}{\hbar^2} \cancel{(E-V)\psi_E} \varphi \\
 &= \underline{\underline{-\frac{2m}{\hbar^2} \psi_E^2}}
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Anstelle des Randwertproblems (4.14) betrachten wir zunächst das Aufgabewertproblem

$$H \psi_E = E \psi_E \quad \text{mit} \quad \psi_E(L_1) = 0 \quad \psi_E'(L_1) = C \neq 0, \tag{4.17}$$

wobei der Wert von C wegen Linearität der Schrödinger-Gleichung irrelevant ist. Für generisches $E \in \mathbb{R}$ liefert eine Integration von (4.17) zwar eine Lösung des Aufgabewertproblems, die jedoch i. d. R. nicht $\psi_E(L_2) = 0$ erfüllt, d.h. nicht das Eigentliche Randwertproblem (4.14) löst.

An dieser Stelle können wir bereits erwarten, dass eine Lösung des Aufgabewertproblems (4.17) nur für ganz spezielle Werte von E auch eine Lösung für das eigentliche Randwertproblem ist. Dies sind die Eigenwerte E des Hamiltonoperators H . Die

Reduktion von $E \in \mathbb{R}$ auf spezielle bzw. diskrete Werte von E entspricht der "Quantisierung der Energieniveaus" eines Systems.

Wir integrieren nun (4.16) von L_1 bis zu einem Ort $x_2(E) > L_1$, wo ψ_E erstmalig verschwindet

$$\int_{L_1}^{x_2(E)} dx W'(\phi, \psi_E) = \psi_E \phi' - \psi_E' \phi \Big|_{L_1}^{x_2(E)} = \underbrace{\psi_E(x_2(E)) \phi(x_2)}_{=0} - \psi_E'(x_2) \phi(x_2) + \underbrace{\psi_E(L_1) \phi'(L_1)}_{=0} - \underbrace{\psi_E'(L_1) \phi(L_1)}_{=0}$$

weil $\psi_E(L_1) = 0$
für alle E

$$= -\psi_E'(x_2) \phi(x_2) \stackrel{(4.16)}{=} -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{L_1}^{x_2(E)} dx \psi_E^2(x)$$

$$\Rightarrow \psi_E'(x_2(E)) \phi(x_2(E)) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{L_1}^{x_2(E)} dx \psi_E^2(x) > 0$$

mit $E \in \mathbb{R}$ beliebig. (NB: (4.17) besagt, dass $\psi_E'(x_2) \neq 0$, siehe oben). (4.17)

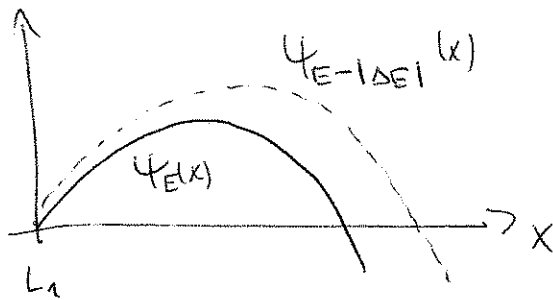
Für $\psi_E > 0$ im Integrationsgebiet, $\Rightarrow \psi_E'(x_2) < 0 \Rightarrow \phi(x_2) < 0$

" $\psi_E < 0$ " $\Rightarrow \psi_E'(x_2) > 0 \Rightarrow \phi(x_2) > 0$

Wegen

$$\begin{aligned} \psi_{E+\Delta E}(x_2(E)) &= \underbrace{\psi_E(x_2(E))}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial \psi_E(x_2(E))}{\partial E}}_{=\varphi} \Delta E + \mathcal{O}(\Delta E^2) \\ &= \varphi(x_2(E)) \Delta E \end{aligned} \quad (4.18)$$

Wandelt also in beiden Fällen mit abnehmender Energie die Nullstelle $x_2(E)$ nach rechts:



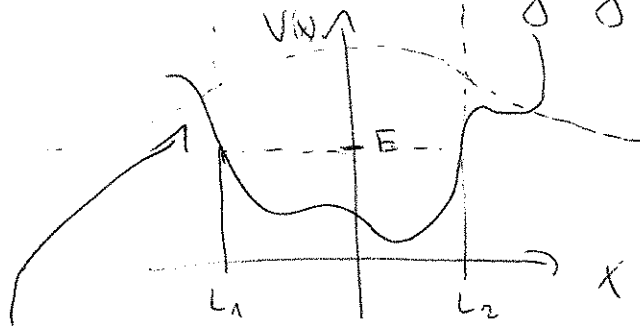
Angenommen, der Grundzustand verschwinde nicht nur bei $L_1 < L_2$ sondern habe dazwischen einen Knoten $x_k, L_1 < x_k < L_2$.
 Nun verringern wir die Energie E , so wandert der Knoten nach rechts. Bei stetiger Verringerung von E wird irgendwann $x_k = L_2$ gelten. Dann hätten wir eine Lösung des Randwertproblems mit kleineren E als der vermeintliche Grundzustand gefunden.

\Rightarrow der Grundzustand kann keinen Knoten haben!

Ähnlich lässt sich zeigen, dass der erste angeregte Zustand einen Knoten hat usw.

⇒ der n -te angeregte Zustand hat n Knoten.

NB: der Knotensatz gilt auch für allgemeine Potentiale mit $V(|x| \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$. Die Dirichlet-Randbedingungen werden dann an den klassischen Umkehrpunkten durch Anschluss-Bedingungen ersetzt



$$\psi_E(L_1 - \varepsilon) = \psi_E(L_1 + \varepsilon) \quad \text{und} \quad \psi'_E(L_1 - \varepsilon) = \psi'_E(L_1 + \varepsilon)$$

und genauso für L_2 . Die Steigung bei L_1 und L_2 ergibt sich wiederum indirekt aus der Normierbarkeitsforderung.

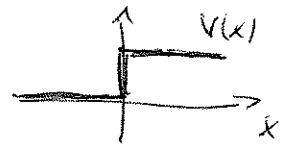
4.3 Barrieren

Wir betrachten nun die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für eine Potentialstufe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{E(x)}'' + V(x)\psi_{E(x)} = E\psi_{E(x)} \quad (4.19)$$

mit

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V > 0 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$



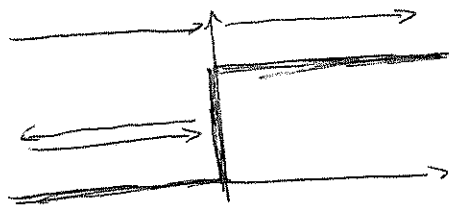
Für ein von links nach rechts einfliegender Teilchen

gilt klassisch:

$$\boxed{E < V:}$$

Teilchen kann in den Bereich $x > 0$ nicht vordringen \Rightarrow

Teilchen wird reflektiert



$$\boxed{E > V:}$$

Teilchen fliegt über die Stufe hinweg.

Für $x > 0$ ist wegen Energieerhaltung seine Geschwindigkeit kleiner.

Quantenmechanisch ergibt sich ein anderes Bild:

Für $V = \text{const}$ finden wir in (4.8) die Lösung

$$E > V: \quad \psi_E(x) = \alpha_+ e^{ikx} + \alpha_- e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} (E - V). \quad (4.20)$$

Berücksichtigt man die Zeitabhängigkeit,

$$e^{ikx} \rightarrow e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - kx\right)} \quad (4.21)$$

so wird deutlich, dass e^{ikx} eine nach rechts laufende Ebene Welle beschreibt, die im folgenden unseren Teilchenstrom darstellen soll.

Für $E > V$ erwarten wir einen durchlaufenden "transmittierten" Anteil, lassen aber auch einen reflektierten Anteil zu. Lösungsansatz ist daher

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha_+ e^{ipx} + \alpha_- e^{-ipx} & , p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, x < 0 \\ \beta e^{ikx} & , k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E-V)}, x > 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

Da der Potentialspung endlich ist, muss ψ_E bei $x=0$ stetig differenzierbar sein:

$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\psi_E(x-\varepsilon) = \psi_E(x+\varepsilon)) \Rightarrow \alpha_+ + \alpha_- = \beta \quad (4.23)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\psi_E'(x-\varepsilon) - \psi_E'(x+\varepsilon)) = 0 \Rightarrow (\alpha_+ - \alpha_-)p = \beta k$$

Da α_+ unsere einlaufende Ansatzbedingung charakterisiert, lösen wir nach α_- und β auf:

$$\Rightarrow \underline{\alpha_-} = \frac{p-k}{p+k} \alpha_+ \quad , \quad \underline{\beta} = \frac{2p}{p+k} \alpha_+ \quad . \quad (4.24)$$

In der Tat lassen sich die Anschlussbedingungen nur erfüllen, wenn es auch eine reflektierende Komponente gibt: $\alpha_- > 0$ für $V > 0$.

Normieren wir $\alpha_+ = 1$, so entsprechen α_- dem Reflektions- und β dem Transmissionskoeffizienten $0 < \alpha_-, \beta \leq 1$ für $V > 0$.

Wichtig: nicht das Teilchen, sondern nur seine Wahrscheinlichkeitsamplitude spaltet sich auf!

Bei einer Ortsmessung findet man das Teilchen entweder links oder rechts.

Für ein Teilchen mit Energie $E < V$ gilt links vor der Stufe $x < 0$ der gleiche Lösungsansatz wie in (4.22), die Lösung rechts der Stufe haben wir bereits in (4.9) gefunden:

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} \alpha_+ e^{ipx} + \alpha_- e^{-ipx} \\ \beta e^{-\kappa x} \end{cases}, \quad p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (4.25)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E)}$$

Stetige Differenzierbarkeit bei $x=0$ führt auf die Bedingungen

$$\begin{aligned} \alpha_+ + \alpha_- &= \beta \\ p(\alpha_+ - \alpha_-) &= i\kappa\beta \end{aligned} \quad (4.26)$$

Da α_+ wiederum die Anfangsbedingung charakterisiert (normiert mit $|\alpha_+| = 1$), lösen wir nach α_- und β :

$$\alpha_- = \frac{p-i\kappa}{p+i\kappa} \alpha_+, \quad \beta = \frac{2p}{p+i\kappa} \alpha_+ \quad (4.27)$$

Hieraus folgt sofort

$$|\alpha_-|^2 = \alpha_-^* \alpha_- = \underbrace{\frac{p+i\kappa}{p-i\kappa}}_{=1} \underbrace{\frac{p-i\kappa}{p+i\kappa}}_{=1} |\alpha_+|^2 = 1 \quad (4.28)$$

Das Ergebnis $|\alpha_-|^2 = |\alpha_+|^2$ besagt, dass die Welle (bzw. das Teilchen) vollständig reflektiert wird.

Einkaufende und auslaufende Welle sind allerdings Phasenverschoben, konventionsbedingt definiert man

$$-e^{2i\delta(E)} := \frac{p-ik}{p+ik} \Rightarrow \cot \delta = \frac{\kappa}{p} \quad (4.29)$$

Die zeitabhängige Lösung hat also die Form

$$\psi(x,t) = \begin{cases} e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - px)} - e^{-i(\frac{E}{\hbar}t + px) - 2i\delta} & \text{für } x < 0 \\ \frac{2p}{p+ik} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot e^{-\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (4.30)$$

Die Phasenverschiebung verschwindet im Limes

$$\frac{p}{\kappa} \rightarrow 0, \text{ d.h. } \frac{E}{\sqrt{E}} \rightarrow 0, \text{ wenn also die}$$

Potentialwand wesentlich höher als die Energie ist,

aus der Tatsache, dass QM-Teilchen in den klassisch verbotenen Bereich eindringen können, können wir übrigens nicht folgern, dass die Energieerhaltung verletzt ist. Bei einer Eindringtiefe von $1/\kappa$ ist zwar die Ortsunschärfe klein $\Delta x \leq 1/\kappa$, die Impulsunschärfe hingegen gross gemäß der Unschärferelation $\Delta p \geq \hbar \kappa$. Die Unschärfe einer Energiemessung beträgt entsprechend

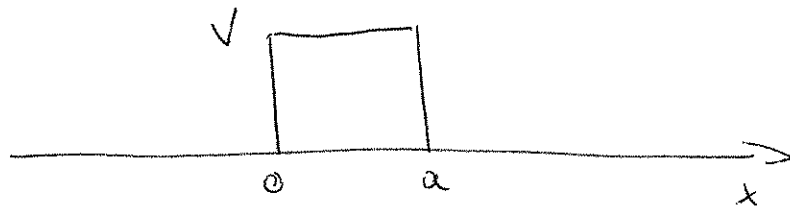
$$\Delta E \sim \frac{\Delta p^2}{2m} \approx V - E, \text{ so dass eine Energiemessung die}$$

Werte $E + \Delta E \approx E + (V - E) = V$ mit einschliesst. Wir können also nicht sicher schliessen, dass das Teilchen im klassisch verbotenen Bereich eine Energie kleiner als V hat.

4.4 Tunnel effekt

Dass QM-Teilchen in den klassisch verbotenen Bereich eindringen können, führt zum wichtigen nicht-klassischen Phänomen des Tunnel effekts.

Wir betrachten ein Potential der Höhe $V > 0$ zwischen $x=0$ und $x=a$



Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung, die zu einer von links einfallenden Welle gehört, hat die Form für $E < V$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha_+ e^{ipx} + \alpha_- e^{-ipx} & \text{für } x < 0 \\ \beta_+ e^{\kappa x} + \beta_- e^{-\kappa x} & \text{für } 0 < x < a \\ \alpha_+ S(E) e^{ip(x-a)} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (4.31)$$

$$\text{mit } p = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)} \quad (4.32)$$

und Amplituden α_+ ($|\alpha_+|^2 = 1$) und zu bestimmenden Amplituden α_- , β_+ , β_- , $S(E)$.

Die Transmissionsamplitude bzw. das "Tunnel-Matrixelement" $S(E)$ kann schon aus Gründen

der stetigen Differenzierbarkeit der Wellenfunktion nicht verschwinden, denn: Wäre $S(E) = 0$, so müsste wegen stetiger Differenzierbarkeit ψ_E überall Null sein, was im Widerspruch zur Anfangsbedingung steht.

Stetige Differenzierbarkeit führt auf die Anschlussbedingungen

$$x=0: \quad \alpha_+ + \alpha_- = \beta_+ + \beta_-$$

$$ip(\alpha_+ - \alpha_-) = \kappa(\beta_+ - \beta_-) \quad (4.33)$$

$$x=a: \quad \beta_+ e^{\kappa a} + \beta_- e^{-\kappa a} = \alpha_+ S(E)$$

$$\kappa(\beta_+ e^{\kappa a} - \beta_- e^{-\kappa a}) = ip \alpha_+ S(E)$$

Dies sind 4 Gleichungen für die 4 Unbekannten $\alpha_-, \beta_+, \beta_-, S(E)$. Die Lösung für $S(E)$ lautet ÜA:

$$S(E) = \frac{2i\kappa p}{2i\kappa p \cosh \kappa a + (p^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a} \quad (4.34)$$

Damit bestimmt sich die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein von links einlaufendes Teilchen durch den Potentialwall tunnelt, zu:

$$T(E) = |S(E)|^2 = \left(1 + \frac{V^2}{4E(V-E)} \sinh^2 ka \right)^{-1}. \quad (4.35)$$

Für große $ka = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E) a^2}$, d.h. hohe und/oder breite Potentialbarrieren, vereinfacht sich das Ergebnis zu

$$T(E) \approx \frac{16 E(V-E)}{V^2} e^{-2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E)}}. \quad (4.36)$$

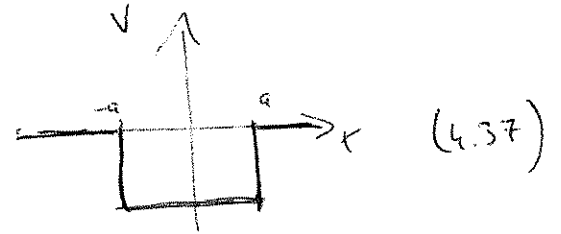
Die Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit der Barrierenbreite und der Wurzel der Barrierenhöhe ab. (NB: in der Regel dominiert die Exponentialfunktion die Tunnelwahrscheinlichkeit, so dass die Berechnung des Exponenten bereits eine gute Abschätzung liefert).

Klassisch verboten ist der Tunneleffekt ein genuin quantenmechanisches Phänomen, das in vielen Systemen anzutreffen ist (α -Zerfall, Ladungsfluss durch Isolatoren, Feldemission, Tunnelioden, etc.).

4.5 Resonanzen

Als weiteres wichtiges Beispiel betrachten wir gebundene Zustände im Potentialtopf:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$



Die Zustände sind gebunden, wenn sie eine Energie $E < 0$ haben, d.h. der Außenbereich $|x| > a$ klassisch verboten ist. Das Potential ist zwar symmetrisch um $x=0$, d.h. symmetrisch unter $x \rightarrow -x$, die Eigenfunktionen zum Hamilton-Operator können allerdings symmetrisch oder anti-symmetrisch sein bzw. gerade oder ungerade; unsere Ansätze unten entsprechend

$$\text{gerade: } \psi_{E(x)} = \begin{cases} \alpha \cos qx & \text{im Topf} \\ \gamma e^{-kx} & \text{außerhalb } x > a \\ \gamma e^{kx} & \text{außerhalb } x < -a \end{cases} \quad (4.38)$$

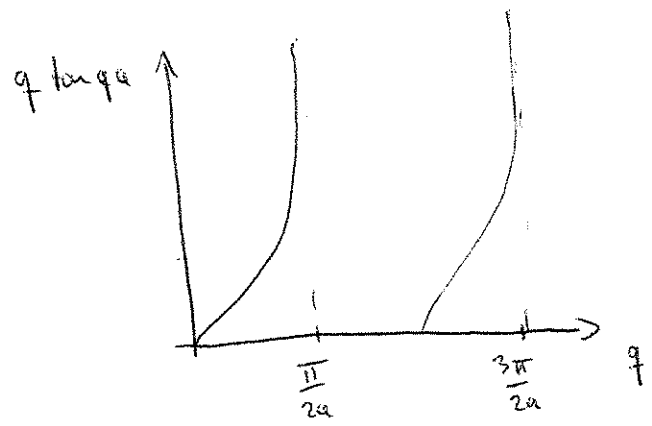
$$\text{ungerade} \quad \psi_{E(-x)} = \begin{cases} \alpha \sin qx & \text{im Topf} \\ \gamma e^{-kx} & x > a \\ -\gamma e^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (4.39)$$

wobei $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E+V)}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)}$, $E < 0$.
 (4.40)

Stetigkeit und Differenzierbarkeit implizieren z.B. für den geraden Fall:

$$\left. \begin{aligned} \alpha \cos qa &= \beta e^{-\kappa a} \\ \alpha q \sin qa &= \beta \kappa e^{-\kappa a} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \underline{q \tan qa = \kappa} \quad (4.41)$$

ähnlich im ungeraden Fall: $\underline{q \cot qa = -\kappa}$



Für kleine V ist q sehr klein, so dass (4.41) nur für einen Wert von E erfüllt werden kann.

Mit zunehmendem V findet man eine zunehmende Zahl von gebundenen Zuständen, abwechselnd gerade und ungerade. Für endliches V bleibt die Zahl der gebundenen Zustände endlich.

Betrachten wir nun wieder von links einlaufende Zustände mit $E > 0$, d.h.

Stromzustände. Bei Anfangsamplitude α_+ gilt der Ansatz

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \alpha_+ e^{ipx} + \alpha_- e^{-ipx} & \text{für } x < -a \\ \beta_+ e^{iqx} + \beta_- e^{-iqx} & \text{für } |x| < a \\ \alpha_+ S(E) e^{ip(x-a)} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (4.42)$$

mit $p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$, $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E+V)}$, $E > 0$. (4.43)

$S(E)$ ist die Transmissionsamplitude.

Stetigkeit und Differenzierbarkeit bei $x = \pm a$ liefert 4 Bedingungen für 4 Unbekannte α_- , β_+ , β_- , $S(E)$.

Die Rechnung ist l anglich, aber folgender Zwischenschritt ist hilfreich:

$$\frac{\alpha_-}{\alpha_+} = \frac{i}{2} \left(\frac{q}{p} - \frac{p}{q} \right) e^{-2ipa} S(E) \sin 2aq$$

$$\frac{\beta_+}{\alpha_+} = \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} + 1 \right) e^{-ia(p+q)} S(E) \quad (4.44)$$

$$\frac{\beta_-}{\alpha_+} = \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} - 1 \right) e^{ia(q-p)} S(E)$$

mit Transmissionsamplitude

$$S(E) = \left(\cos 2aq - \frac{i}{2} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right) \sin 2aq \right)^{-1} \quad (4.45)$$

womit das Problem vollständig gelöst ist.

Die Transmissionswahrscheinlichkeit ergibt sich zu

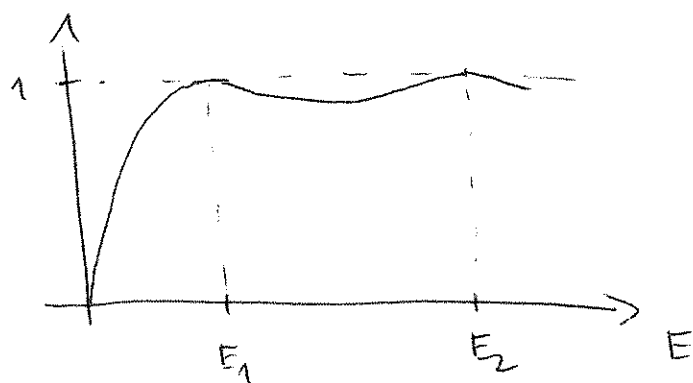
$$\begin{aligned} T(E) = |S(E)|^2 &= \left(\cos^2 2aq + \frac{1}{4} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right)^2 \sin^2 2aq \right)^{-1} \\ &= \left(\frac{p^2}{q^2} + \frac{q^2}{p^2} + 2 \right) = 2 + \left(\frac{E}{E+V} + \frac{E+V}{E} \right) = 2 + \frac{E^2 + (E+V)^2}{E(E+V)} = \frac{2E^2 + 2EV + V^2}{E(E+V)} + 2 \\ &= 4 + \frac{V^2}{E(E+V)} \\ &= \left(1 + \frac{V^2}{4E(E+V)} \sin^2 2aq \right)^{-1} \quad (4.46) \end{aligned}$$

$T(E)$ ist ≤ 1 , wobei das Gleichheitszeichen für

$\sin 2aq = 0$ gilt

$$\Rightarrow q = n\pi \Rightarrow E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} - V, \quad n=1, 2, \dots \quad (4.47)$$

D.h. fliegt ein Teilchen mit dieser Energie $E = E_n$, wird das Potential vollständig transparent. Stromerhaltung verlangt nun, dass gleichzeitig die Reflexion verschwindet, $\alpha(E_n) = 0$, was in der Tat an (4.44) ablesbar ist.



Diese Maxima von T heißen Resonanzen.

Eine weitere wichtige Eigenschaft der Transmissionsamplitude $S(E)$ lässt sich in diesem

Beispiel gut studieren: $S(E)$ hat Pole bei

$$\cos 2\alpha q = \frac{i}{2} \left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p} \right) \sin 2\alpha q \quad (4.48)$$

Diese Gleichung hat nur Lösungen für imaginäre p . Ist $\text{Im } p > 0$, so fallen der transmittierte und der reflektierte Anteil exponentiell ab. Für endlich β_+ und β_- muss an den Polen von $S(E)$ wegen (4.44) gelten, dass $\alpha_+ = 0$. Also gibt es auch keine exponentiell nach $x \rightarrow -\infty$ anwachsende Einlaufende Welle. Diese exponentiell nach den Seiten abfallende Lösung entspricht offensichtlich den gebundenen Zuständen. In der Tat entspricht die Polbedingung genau der Bedingung für gebundene Zustände, denn

$$\tan 2aq = \frac{\sin 2aq}{\cos 2aq} = \frac{2}{i} \frac{1}{\left(\frac{p}{q} + \frac{q}{p}\right)} \quad (4.49)$$

$$= 2 \left(\cot aq - \tan aq \right)^{-1} \Rightarrow \cot aq - \tan aq = \frac{ip}{q} - \frac{q}{ip}$$

Lösung
 \Rightarrow

$$q \cot aq = ip, \quad q \tan aq = -ip$$

(4.50)

was mit $p = ik$ genau den in (4.41) gebundenen Bedingungen für gebundene Zustände entspricht.

Die Polstellen der Transmissions- oder Streuamplitude $S(E)$ entsprechen den Energien der gebundenen Zustände.