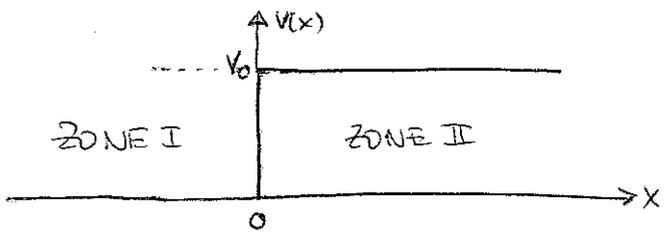


EINDIMENSIONALE POTENTIALE

- Wir werden nun einfache 1D Modelle lösen. Später in dieser Vorlesungsteile werden wir auch 3D Systeme studieren.
- Wir werden hier die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für verschiedene 1D Potentialen $V(x)$ studieren. Gleichzeitig werden wir wichtige Begriffe der Quantenphysik einführen.

A. DIE POTENTIALSTUFE

• Wir werden zuerst ein Potential $V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$ betrachten.



$x < 0 \rightarrow$ zone I
 $x > 0 \rightarrow$ zone II

• Wir wollen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lösen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x) u(x) = E u(x)$$

wobei $E \equiv$ Eigenenergien
 $u(x) \equiv$ Eigenfunktionen

• Wir schreiben die Schröd.-gleichung ein bisschen um:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] u(x) = 0$$

• Sei $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$

$q^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

← Die Energie E kann $> V_0$ aber auch $< V_0$ sein. Wir werden das später untersuchen.

* sehen wir zuerst was passiert für $x < 0$ (ZONE I)

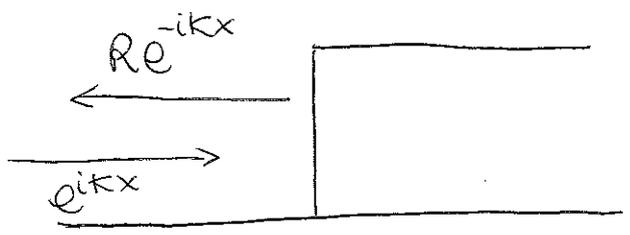
Für $x < 0$: $V(x) = 0$, also:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -k^2 u(x)$$

Die allgemeinste Lösung ist der Form $u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ (ganz klar $\frac{d^2}{dx^2} e^{\pm ikx} = -k^2 e^{\pm ikx}$). Eigentlich (wir werden gleich sehen warum) werden wir die allgemeinste Lösung in der Form:

$$u_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

Schreiben.



Wir können e^{ikx} als die von links einlaufende Welle betrachten. $R e^{-ikx}$ ist die reflektierte Welle.

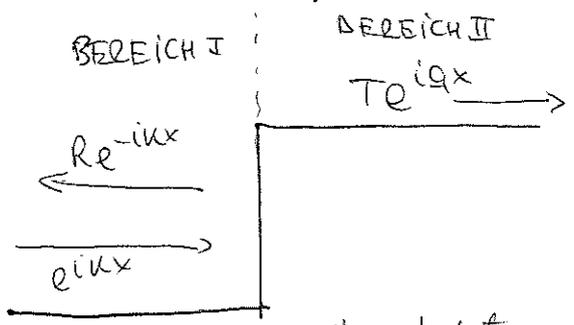
* sehen wir nun die zone II ($x > 0$)

Für $x > 0 \rightarrow V(x) = V_0$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -q^2 u(x) ; \text{ wir werden zuerst annehmen } E > V_0, \text{ also } q \in \mathbb{R}. \text{ Wir werden später } E < V_0 \text{ studieren}$$

Die allgemeinste Lösung ist im Prinzip eine Linearkombination aus e^{iqx} und e^{-iqx} . Aber in unserem "Experiment" wollen wir von links eine Welle (e^{ikx}) einlaufen lassen, und damit darf im Bereich II nur die nach rechts weiterlaufende (transmittede) Welle erscheinen $\rightarrow e^{iqx}$.

$$\text{Also } u_{II}(x) = T e^{iqx}$$



* Um das besser zu verstehen werden wir die Idee um Atomdichte einführen.

* STROMDICHTE :

* Nehmen wir die Schrödinger-Gleichung im freien Raum

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Komplex-Konjugiert:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}$$

Also

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x,t)|^2 &= \frac{\partial}{\partial t} [\psi^* \psi] = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[-\frac{d^2 \psi^*}{dx^2} \psi + \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[-\left\{ \frac{d}{dx} \left[\frac{d\psi^*}{dx} \psi \right] - \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} \right\} + \left\{ \frac{d}{dx} \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right] - \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} \right\} \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \right\} \end{aligned}$$

Man definiert die Stromdichte als:

$$j(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$$

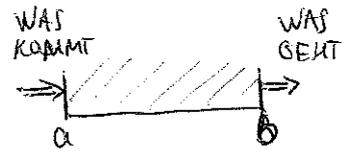
Also

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} j(x,t)$$

wobei $P(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2$
↓
Die Dichte
(Wahrscheinlichkeitsdichte)

ERHALTUNGSSATZ

Das bedeutet, dass
> Eine Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte in einem x-Bereich
einen Netto-Teilchenstrom in diesem Bereich zur Folge hat:



$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b P(x,t) dx = - \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) dx = \underbrace{j(a,t)}_{\text{WAS KOMMT}} - \underbrace{j(b,t)}_{\text{WAS GEHT}}$$

WIE ÄNDERT SICH DIE WAHRSCHEINLICHKEIT IM BEREICH (a,b)

* Fürs Bereich I der Potential-Stufe die Stromdichte in die positive x-Richtung ist:

$$\begin{aligned}
j_I &= -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ U_I^* U_I' - U_I'^* U_I \right\} \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ (e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) ik (e^{ikx} - R e^{-ikx}) \right. \\
&\quad \left. + ik (e^{-ikx} - R^* e^{ikx}) (e^{ikx} + R e^{-ikx}) \right\} \\
&= +\frac{\hbar k}{2m} \left\{ [1 - |R|^2 + R^* e^{2ikx} - R e^{-2ikx}] \right. \\
&\quad \left. + [1 - |R|^2 - R^* e^{2ikx} + R e^{-2ikx}] \right\} \\
&= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2)
\end{aligned}$$

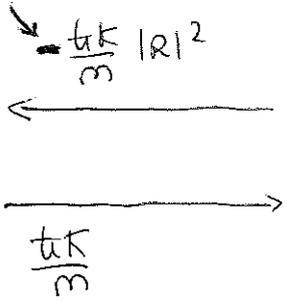
* Fürs Bereich II:

$$\begin{aligned}
j_{II} &= -\frac{i\hbar}{2m} (U_{II}^* U_{II}' - U_{II}'^* U_{II}) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \left[T^* e^{-iqx} iq T e^{iqx} + iq T^* e^{-iqx} T e^{iqx} \right] \\
&= \frac{\hbar q}{m} |T|^2
\end{aligned}$$

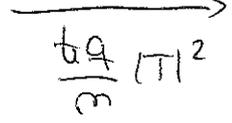
* Wegen des Erhaltungssatzes, muß die Stromdichte rechts und links von der Stufe gleich sein:

$$\boxed{\frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2} \rightarrow \text{Erhaltungssatz. Diese Bedeutung ist ganz klar:}$$

(REFLEKTIERTER STROM)



(TRANSMITTIERTER STROM)



$$\boxed{\text{WAS KOMMT}} - \boxed{\text{WAS REFLEKTIERT WIRD}} =$$

$$= \boxed{\text{WAS TRANSMITTIERT WIRD}}$$

* Wir werden nun T und R rechnen

* Die Wellenfunktion ist stetig, also in $x=0$

$$u_I(0) = u_{II}(0)$$

Also $\boxed{A + R = T}$ (1)

* Die Wellenfunktion ist auch stetig differenzierbar, also $\frac{du}{dx}$ ist auch stetig in $x=0$.

Das ist ganz einfach zu beweisen, und zwar aus der Schröd.-gleichung:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_\epsilon - \left(\frac{du}{dx}\right)_{-\epsilon} = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx}\right) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] u(x) =$$

$$\approx \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 \epsilon] u(0) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$$

Also $\boxed{\left(\frac{du}{dx}\right)_{0^+} = \left(\frac{du}{dx}\right)_{0^-}}$

NOTE: Aber, und das ist wichtig wie wir später sehen werden, wenn das Potential $V(x) = V_0 \delta(x-a)$, wobei $\delta \equiv$ Dirac-Delta, dann

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) u(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 u(a)$$

$$\text{also } \left(\frac{du}{dx}\right)_{a^+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a^-} = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 u(a)$$

Für ein ^{Ableitung der} Delta Potential ist die Wellenfunktion nicht stetig.

* Aber für weiteres Potential jetzt $\left(\frac{du}{dx}\right)_{0^+} = \left(\frac{du}{dx}\right)_{0^-}$

also $u'_I(x=0) = u'_{II}(x=0)$

$$u'_I(x) = ik [e^{ikx} + R e^{-ikx}] \xrightarrow{x=0} ik(S - R)$$

$$u'_{II}(x) = iq T e^{iqx} \xrightarrow{x=0} iqT$$

• Also $\boxed{ik(1-R) = iqT} \quad (2)$

• Aus Gleichungen (1) und (2) bekommen wir

$$R = \frac{k-q}{k+q}$$

$$T = \frac{2k}{k+q}$$

* Also der reflektierte Strom ist

$$\frac{\hbar k}{m} |R|^2 = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2$$

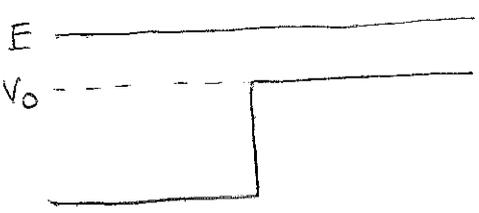
und der transmittierte Strom

$$\frac{\hbar q}{m} |T|^2 = \frac{\hbar k}{m} \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

• Man kann einfach sehen, dass $\frac{\hbar k}{m} (1-|R|^2) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2$

wie wir schon gesehen haben (Erhaltungssatz).

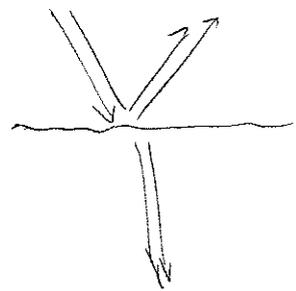
• Man kann auch sehen, dass der reflektierte Strom ist nicht Null, sogar wenn $E > V_0$ ist. Das ist klassisch nicht zu verstehen:



* klassisch werden die Teilchen ^{ab}gestreut, aber nicht reflektiert werden.

* Die Teilchen haben eine gewisse Wahrscheinlichkeit von Reflexion und von Transmission, also

wie Wellen an einer Oberfläche, für Wellen hat man Reflexion und Refraktion.



* Die Reflexion für $E > V_0$ heißt QUANTENREFLEKTION

* Natürlich, wenn $E \gg V_0$, dann $q \approx k$, und $|R|^2 \approx 0$

Für sehr energetische Teilchen spielt die Potentialstufe keine Rolle.

* Was passiert wenn $E < V_0$?

* Wenn $E < V_0 \Rightarrow q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \rightarrow q = i|q|$

Und die Lösung in dem Bereich II ist der Form $U_{II}(x) = T e^{-q x}$

* Das ist interessant, ein Teil der Wellenfunktion liegt in dem klassischen ~~verbotenen~~ verbotenen Bereich



* Das ist unsere erste Kontakt mit dem Tunnel-Effekt.

Mehr darüber später.

* Natürlich existiert in Bereich II kein Strom, weil $U_{II}(x)$ ist eine reelle Lösung, und $j(x)$ verschwindet für reelle Lösungen.

* Also durch das **Stufenpotential** haben wir schon wichtige Ideen eingeführt

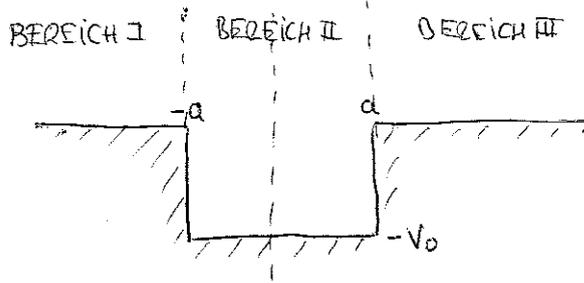
* Wir haben gesehen, daß quantenmechanisch wir haben für $E > V_0$ teilweise Transmission und Reflexion (Quantenreflexion)

* Wir haben die erste Andeutungen des Tunneleffektes gesehen.

* Nun werden wir andere Potentiale studieren, um noch mehr wichtige Ideen einzuführen.

B) DER POTENTIAL GRABEN

* Wir betrachten nun $V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases}$



• Wie immer wollen wir die Eigenfunktionen und Eigenwerte finden.

* Sei $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{Nun die Energie } E \text{ kann auch negative} \\ \text{sein. wir werden zuerst } E > 0 \text{ betrachten} \\ \text{und sp\u00e4ter } E < 0. \end{array} \right.$

$q^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$

* Im Bereich I: $\frac{d^2}{dx^2} u_I(x) = -k^2 u_I(x) \rightarrow u_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$

Note: Wie f\u00fcr das ~~Stufen~~potential betrachten wir hier eine von links einlaufende Welle.

* Im Bereich II: $\frac{d^2}{dx^2} u_{II}(x) = -q^2 u_{II}(x) \rightarrow u_{II}(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx}$

* Im Bereich III: $\frac{d^2}{dx^2} u_{III}(x) = -k^2 u_{III}(x) \rightarrow u_{III}(x) = T e^{+ikx}$
(wie f\u00fcr das Stufenpotential)

* Die Wellenfunktion ist stetig also:

$$u_I(-a) = u_{II}(-a) \rightarrow e^{-ika} + R e^{ika} = A e^{-iaa} + B e^{+iaa} \quad (1)$$

$$u_{II}(a) = u_{III}(a) \rightarrow A e^{iaa} + B e^{-iaa} = T e^{ika} \quad (2)$$

* Die erste Ableitungen sind:

$$u_I'(x) = ik [e^{ikx} - R e^{-ikx}]$$

$$u_{II}'(x) = iq [A e^{iqx} - B e^{-iqx}]$$

$$u_{III}'(x) = ik T e^{ikx}$$

* Die 1. Ableitungen sind auch stetig:

$$u_I'(-a) = u_{II}'(-a) \rightarrow ik [e^{-ika} - R e^{ika}] = iq [A e^{-iqa} - B e^{iqa}] \quad (3)$$

$$u_{II}'(a) = u_{III}'(a) \rightarrow iq [A e^{iqa} - B e^{-iqa}] = ik T e^{ika} \quad (4)$$

* Also wir haben 4 Gleichungen (für 4 Unbekannte A, B, R und T).

Man kann diese Gleichungen lösen:

$$R = i e^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin 2qa}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa}$$

$$T = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa}$$

* Wenn $E \gg V_0 \Rightarrow q \approx V_0$ und $q^2 - k^2 \ll 2kq, q^2 + k^2$

Dann $R \approx 0 \Rightarrow$ wie wir erwartet, weil wenn $E \gg V_0$ die kinetische Energie der Teilchen ist viel größer.
(Fast vollständige Transmission)

Aber sogar wenn $E \sim V_0$, kann man $R = 0$ haben. Das passiert

wenn $\sin 2qa = 0 \rightarrow$ Das ist eine sogenannte Transmissionsresonanz.

(NOTE: Resonanzen sind Spezialfälle wobei anomal große Effekte auftreten. Wir werden in dieser Vorlesungsreihe andere Beispiele von Resonanzen sehen.)

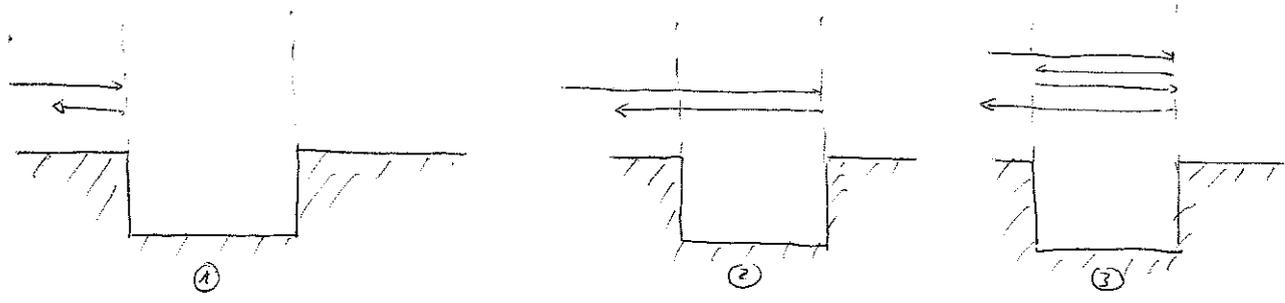
* Also die Transmissionsresonanzen verlangen $2qa = n\pi \rightarrow q = \frac{n\pi}{2a}$

$$\rightarrow \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \right]^{1/2} = \frac{n\pi}{2a} \rightarrow \boxed{E_n = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}}$$

* Für andere (normale) Fälle wenn $E \rightarrow 0$, geht $T \rightarrow 0$.

Aber für die Resonanzen $T \rightarrow 1$.

* Wo kommt diese Resonanz her?



Die Resonanz kommt aus der destruktiven Interferenz zwischen der bei $x = -a$ reflektierten Welle ①, und den anderen, die 1 Mal, 2 Mal, usw bei $x = a$ reflektiert werden und nach links auslaufen.

Das passt genau wenn $2ga = n\pi \rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{g} = \frac{4a}{n}$

(NOTE: Das ist genau die Bedingung für ein sogen. Fabry-Pérot-Interferometer in Optik) \Rightarrow Noch mal die Wellennatur der Q-Mechanik!

* Bisher haben wir nur Lösungen mit $E > 0$.

Was passiert wenn $E < 0$?

Da das Potential $V = -V_0$ zwischen $-a$ und a ist, kann man Lösungen mit $E < 0$ erwarten, aber diese Lösungen können nur im Bereich $(-a, a)$ lokalisiert sein. Sehen wir das.

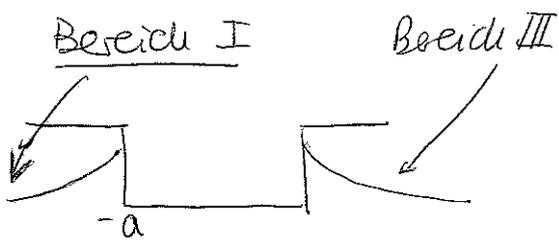
Für $E < 0 \rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = -k^2$

Die Lösungen im Bereich I und im Bereich III sind also

$u_I(x) = C_1 e^{kx} \quad x < -a$

$u_{III}(x) = C_2 e^{-kx} \quad x > a$

* Graphisch dargestellt:



⇒ Exponentielle Zerfall für beide Bereiche.

(NOTE: Es gibt kein Strom im Bereich I und im Bereich III, da dort $u(x)$ ist eine reelle Lösung)

* Im Bereich II haben wir:

$$u(x) = A \cos qx + B \sin qx$$

wobei $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) > 0$ (also $|E| > V_0$ sein, sonst gibt's keine Lösung)

• Wie immer müssen wir die Stetigkeit der Wellenfunktion und der 1. Ableitung verlangen:

(1) $u_I(a) = u_{II}(-a) \rightarrow C_1 e^{-ka} = A \cos qa - B \sin qa$

(2) $u_I'(a) = u_{II}'(-a) \rightarrow -k C_1 e^{-ka} = q [A \sin qa + B \cos qa]$

(3) $u_{II}(a) = u_{III}(a) \rightarrow C_2 e^{-ka} = A \cos qa + B \sin qa$

(4) $u_{II}'(a) = u_{III}'(a) \rightarrow -k C_2 e^{-ka} = -q (A \sin qa - B \cos qa)$

Wenn wir $\frac{(2)}{(1)} \rightarrow k = q \left(\frac{A \sin qa + B \cos qa}{A \cos qa - B \sin qa} \right)$

$\frac{(4)}{(3)} \rightarrow k = q \left(\frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa} \right)$

Also $(B^2 + A^2) \sin qa \cos qa + BA = (B^2 - A^2) \sin qa \cos qa - BA$

Also $AB = 0 \rightarrow \begin{cases} B = 0 \Rightarrow u_{II}^{(+)}(x) = \cos qx \\ A = 0 \Rightarrow u_{II}^{(-)}(x) = \sin qx \end{cases}$

* Also wie für das Kartential haben wir 2 verschiedene Lösungen: gerade ($u^{(+)}$) und ungerade ($u^{(-)}$).

(NOTE: Das war eigentlich zu erwarten, wegen der Symmetrie des Potentials. Ich erinnere euch an unsere Diskussion über den Paritätsoperator)

* Nehmen wir zuerst die gerade Funktionen ($B=0$): Dann:

$$\boxed{\kappa = q \tanh qa}$$

Das ergibt eine Bedingung für die möglichen Werte von E die wir haben können, also eine Diskretisierung der Energie (wie für das Potentialkasten). Hier die Bedingung ist irgendwie komplizierter.

Sehen wir das. Wir kennen, daß $\frac{2m|E|}{\hbar^2} = \kappa^2$, und $\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) = q^2$

$$\text{Also } \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 - \frac{2m|E|}{\hbar^2} a^2 = (qa)^2 \Rightarrow \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 - (\kappa a)^2 = (qa)^2$$

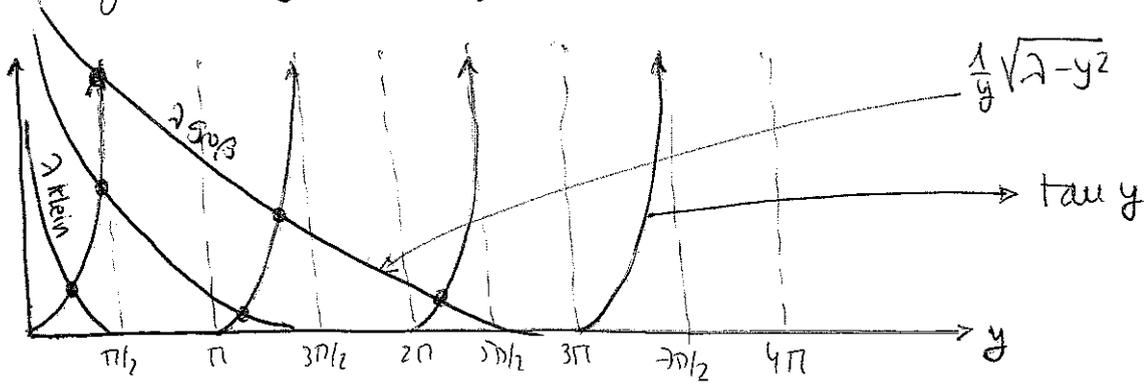
$$\text{Sei } \lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \Rightarrow (\kappa a)^2 = \lambda - (qa)^2$$

$$\text{Also } \kappa a = qa \tanh qa \text{ bekommt } \boxed{\sqrt{\lambda - (qa)^2} = (qa) \tanh(qa)}$$

$$\text{Sei } y = qa \longrightarrow \frac{1}{y} \sqrt{\lambda - y^2} = \tanh y$$

Also für jeden Wert von λ (also für verschiedene V_0) haben wir verschiedene Lösungen y (also verschiedene Werte von q , also verschiedene Werte von E).

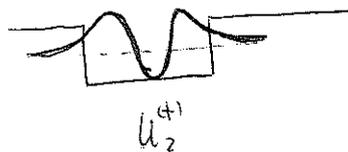
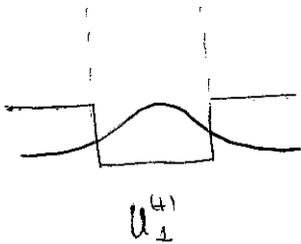
• Diese Gleichung kann graphisch gelöst werden:



• Je größer ist λ (also je tiefer ist der graue) desto mehr Lösungen hat man [eigentlich wenn $\lambda \rightarrow \infty \Rightarrow \tan y = \infty \Rightarrow \Rightarrow qa = (n + 1/2)\pi \Rightarrow$ m. für das Potentialkanten]

• Für sehr kleine λ (sehr kleine V_0) gibt's immer eine Lösung

• Wie sehen diese Lösungen aus? Eigentlich ziemlich ähnlich wie die Lösungen des Kastenpotentials:

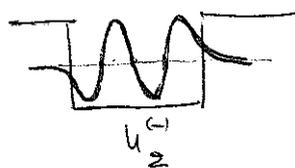
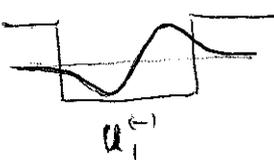


• Für die ungerade Funktionen^(A=0) ist es ähnlich, aber nun $k = -q \cot qa \rightarrow ka = -qa \cot qa \rightarrow \frac{1}{y} \sqrt{\lambda - y^2} = -\cot y$

Man kann noch mal diese Gleichung graphisch lösen.

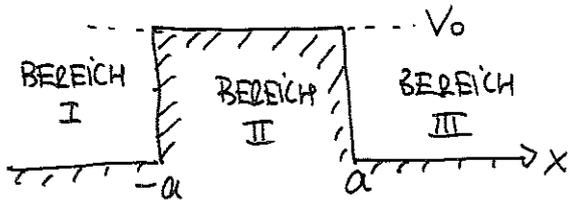
• Für $\lambda \rightarrow \infty \Rightarrow qa = n\pi$ (Potentialkanten)

• Es gibt nur eine Lösung wenn $\lambda > \frac{\pi^2 \hbar^2}{4} \rightarrow V_0 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 m a^2}$



C. DER POTENTIALWALL

- Wir werden nun ein Potential $V(x) = V_0 > 0 \quad |x| < a$
 $= 0 \quad |x| > a$



- Wir sind hier nur an Energien $E < V_0$. Klassisch betrachtet würde das heißen, daß das Teilchen nicht durch die Barriere gehen könnte. Das gesamte Bereich II ist für $E < V_0$ klassisch verboten.

Wir werden nun sehen, daß quantenmechanisch das ist nicht der Fall.

- Wie für die andere Beispiele, wir definieren

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \longrightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} u_{\text{I}}(x) = -k^2 u_{\text{I}}(x) \quad (\text{auch für III})$$

$$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad \longrightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} u_{\text{II}}(x) = K^2 u_{\text{II}}(x)$$

Die Lösungen im Bereich I und III sind:

$$u_{\text{I}}(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

$$u_{\text{III}}(x) = T e^{ikx}$$

und im Bereich II: $u_{\text{II}}(x) = A e^{Kx} + B e^{-Kx}$

* Wir müssen nun die Stetigkeitsbedingungen erfüllen

$$U_I(-a) = U_{II}(-a)$$

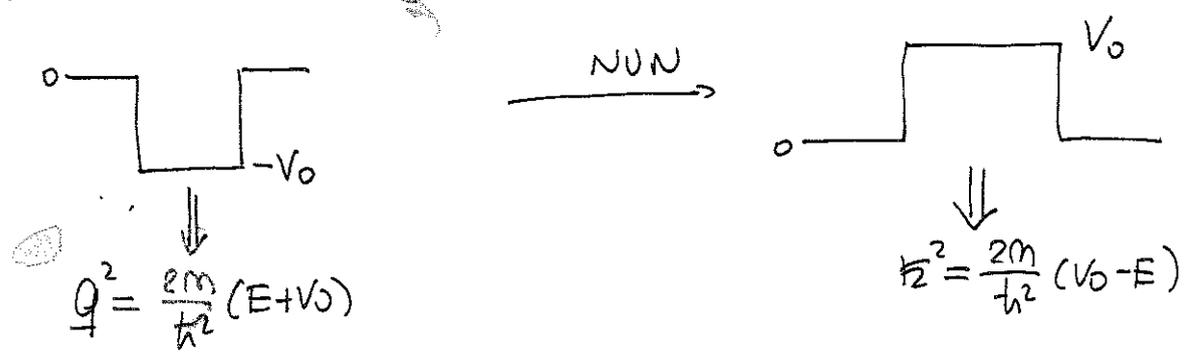
$$U'_I(-a) = U'_{II}(-a)$$

$$U_{II}(a) = U_{III}(a)$$

$$U'_{II}(a) = U'_{III}(a)$$

* Eigentlich die Rechnung ist fast identisch wie die Rechnung für den Potentialgraben, nur jetzt $V_0 \rightarrow -V_0$

Für den Potentialgraben hatten wir



Also eigentlich wenn wir $V_0 \rightarrow -V_0$ nehmen,

$$k^2 \rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = -k^2 \implies q = ik$$

Also in den Formeln für den Potentialgraben werden wir q mit ik ersetzen:

$$T_{\text{Pot. GRABEN}} = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cosh 2qa - i(q^2 + k^2) \sinh 2qa}$$

$$T_{\text{Pot. WALL}} = e^{-2ika} \frac{2ki k}{2ik k \cosh 2ka - i(\cancel{k^2} + k^2) (\sinh 2ka) \cdot i}$$

Ich erinnere euch daß
 $\sin(i\alpha) = i \sinh(\alpha)$
 $\cos(i\alpha) = \cosh(\alpha)$

• Also $T = e^{-2ika} \frac{2k\kappa}{2k\kappa \cosh 2\kappa a - i(k^2 - \kappa^2) \sinh 2\kappa a}$

• Dann $|T|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 2\kappa a + (2k\kappa)^2}$

Also es gibt doch Transmission sogar für $E < V_0$.

Das ist der sogen. TUNNEL-EFFEKT

(NOTE: Dieser Effekt ~~ist~~ ist sehr wichtig und hat viele fundamentale und auch angewandte Folgen).

• Für großes κa : $|T|^2 \approx \left(\frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2}\right)^2 e^{-4\kappa a}$
 ($\sinh 2\kappa a \approx \frac{e^{+2\kappa a}}{2}$)

Also $|T|^2$ geht kleiner und kleiner wenn $\kappa a \gg 1$, also wenn

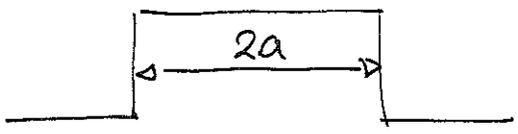
- Die Barriere ist breiter (also wenn a ist größer)
- Die Barriere ist "höher" (also wenn V_0 wächst)

• Wie können wir den Tunneleffekt am besten verstehen?

- Die Heisenberg-Unschärferelationen werden uns helfen.
- Klassisch betrachtet Bereich II ist verboten weil für $E < V_0$ die kinetische Energie $E_{kin} = E - V_0$ negativ wäre.

* Aber quantenmechanisch müssen wir ein bisschen vorsichtiger sein.

* Wenn mein Teilchen ist innerhalb der Barriere, das heißt, daß $\Delta x \sim a$



* Da $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ (ich vergesse hier Faktoren 1/2 oder so, da ich hier nur eine qualitative Diskussion führen will).

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{a}$$

* Also die kinetische Energie ~~von dem~~ des Teilchens hat eine Unschärfkeit:

$$\Delta E_{kin} = \frac{\Delta p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

* Wenn $\Delta E_{kin} \ll |E - V_0|$, das bedeutet, daß mein Teilchen hat ~~mit~~ mit ^{guter} Genauigkeit eine negative kinetische Energie, in diesem Fall soll $|T|^2$ zu Null gehen. Und das ist genau der Fall:

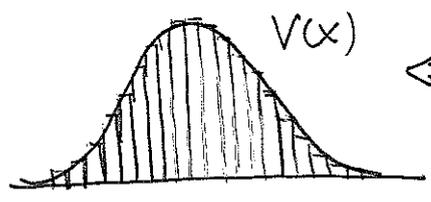
$$\Delta E_{kin} \ll |E - V_0| = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lesssim \Delta E_{kin} \ll \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

also $ka \gg 1$; wie wir schon kennen.

* Aber wenn $\Delta E_{kin} \approx (E - V_0)$ dann ist die ^{kinetische} Energie des Teilchens innerhalb der Barriere nicht mit 100% Wahrscheinlichkeit negativ! Also das Teilchen kann doch durchgehen!

* Der Potentialwall ist natürlich eine Idealisierung.
Typischerweise ist die Barriere nicht rechteckig.

Nehmen wir einen glatten Potentialverlauf:



← UV werden die glatte Barriere durch mehrere nebeneinandergesetzte rechteckige Barriere.

* Für eine rechteckige Barriere mit einer Breite $2a$, wir haben schon gesehen

dass $|T|^2 \approx \left(\frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 e^{-4\kappa a}$ wobei $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$

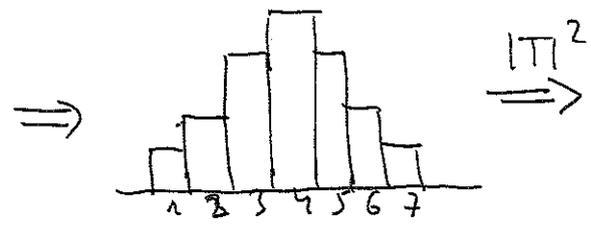
* Also $\ln |T|^2 \approx -2\kappa(2a) + 2 \ln \frac{4(\kappa a)(\kappa a)}{(\kappa a)^2 + (\kappa a)^2}$

Typischerweise ~~das~~ das **1.** Glied für alle vernünftige Werte von κa überwiegt.

Also $\ln |T|^2 \approx -2\kappa(2a)$

* Für die glatte Barriere die gesamte Transmission ist $|T|^2 = \prod_j |T_j|^2$ wobei $|T_j|^2$ ist die Transmission durch die j -te Barriere.

(Alle rechteckige Barriere haben eine Breite Δx)



Also $\ln |T|^2 \approx \sum_j \ln |T_j|^2 \approx \sum_j [-2\kappa_j \Delta x]$

wobei $\kappa_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E)}$ $V_j \equiv$ Potential an der Stelle j .

* Wenn die Barriere schmaler und schmalere sind, also $\Delta x \rightarrow 0$, dann sollen wir $\sum_i \Delta x$ durch $\int dx$ ersetzen. Und $V_i \equiv V(x)$.

Also:
$$\ln |T|^2 \approx -2 \int dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]}$$

Also
$$|T|^2 \approx e^{-2 \int dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)}}$$

* Wir haben diese Formel ein bisschen qualitativ bekommen. Diese Formel kann aber mit Hilfe des sogen. WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) - Näherungsverfahrens hergeleitet werden. Wir werden dieses Verfahren hier nicht detaillieren. (Die Formel setzt in Ordnung ~~Wenn~~ $V(x)$ sich nur langsam mit x ändert.)

* Der Tunneleffekt ist sehr wichtig in vielen Bereichen, von Festkörperphysik bis zur Kernphysik. Dieser Effekt ist hinter viele praktische Anwendungen der Quantenmechanik.

* Wir werden nun ein Beispiel sehen, und zwar in der Kernphysik.

BEISPIEL: α -ZERFALL

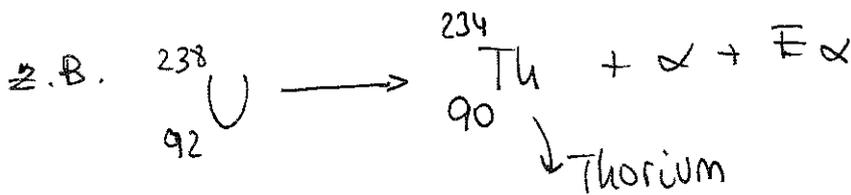
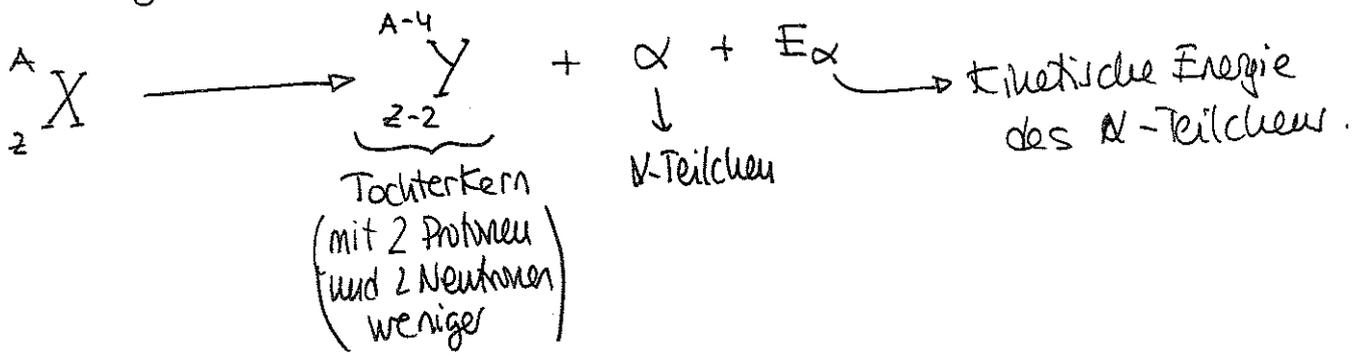
* Wir haben schon gesehen (Diskussion über das Rutherford-Experiment), daß α -Teilchen Helium-Kerne sind (also 2 Protonen und 2 Neutronen).

* Ein Kern X hat Z Protonen und N Neutronen.

Man schreibt ${}^A_Z X$ wobei $A = Z + N$

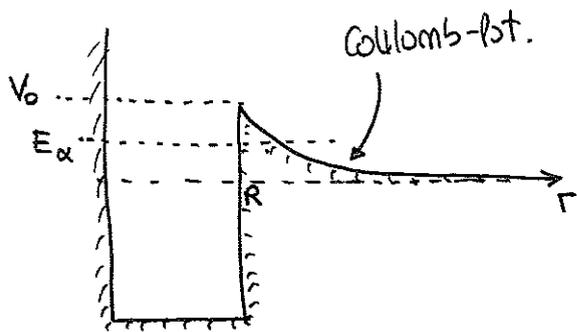
z.B. ${}^{238}_{92} U \rightarrow$ Uranium-238 (vielleicht hat ihr schon etwas über Uranium-238 gelesen)

* Manche Kerne sind nicht stabil, die zerfallen.
Der sogen. α -Zerfall ist ein Prozess der Form:



* Die Physik von Kerne ist relativ kompliziert, aber der α -Zerfall kann relativ einfach verstanden werden. Der Zerfall eines Kerns in ein α -Teilchen und einen Tochterkern kann als Tunnelprozess des α -Teilchens durch den Coulombschen Potentialwall zwischen Tochterkern und α -Teilchen beschrieben werden.

* Spielzeug-Modell



- * Wir beschreiben den Kern durch ein Potential $V(r)$ für das α -Teilchen.
- * Das α -Teilchen soll eine Energie $E_\alpha > 0$ haben (sonst fliegt das Teilchen nie raus).

* Außerdem gibt's ein Coulombisches Potential $V(r) = \frac{(z-2)2e^2}{r}$ zwischen Tochterkern (mit Ladung $z-2$) und α -Teilchen (mit Ladung $+2$).

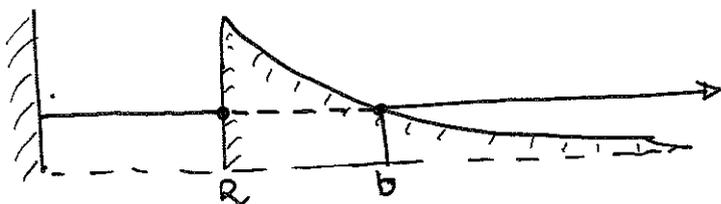
* Der Abstand R ist der Kernradius (typischerweise ~ 10 fm, $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$).

* Die Höhe der Barriere $V_0 = \frac{(z-2)2e^2}{R} > E_\alpha$

(z.B. für den Zerfall von U-238, $E_\alpha \sim 5 \text{ MeV}$, und $V_0 \sim 25 \text{ MeV}$).

Also das Teilchen fliegt raus nur wegen des Tunneleffekts!

* O.k. nun haben wir alles was wir brauchen um die Rechnung des Zerfalls zu rechnen:



* Wir werden nun die WKB

Formel:

$$|T|^2 \approx e^{-2 \int_R^b dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]}}$$

wobei $V(r) = \frac{2(z-2)e^2}{r} = \frac{2(z-2)e^2}{R} \frac{R}{r} = V_0 \left(\frac{R}{r} \right)$

• Für $r=b \rightarrow V(b) = E \rightarrow E = V_0 \left(\frac{R}{b} \right)$

* Also

$$|T|^2 \approx \exp \left\{ -2 \sqrt{\frac{2mV_0 R}{\hbar^2}} \int_R^b dr \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b} \right)^{1/2} \right\}$$

Das Integral kann exakt berechnet werden:

$$\begin{aligned} \int_R^b dr \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b} \right)^{1/2} &= \int_R^b \frac{dr}{\sqrt{b}} \left(\frac{1}{r/b} - 1 \right)^{1/2} \quad \leftarrow \tilde{r} = r/b \\ &= \sqrt{b} \int_{R/b}^1 d\tilde{r} \left(\frac{1-\tilde{r}}{\tilde{r}} \right)^{1/2} \quad \leftarrow \tilde{r} = \sin^2 \phi \\ &= \sqrt{b} \int_{\phi_0}^{\phi_1} d\phi \, 2 \cos^2 \phi = \sqrt{b} \int_{\phi_0}^{\phi_1} d\phi (1 + \cos 2\phi) = \sqrt{b} \left[\phi + \frac{1}{2} \sin 2\phi \right]_{\phi_0}^{\phi_1} \\ &= \sqrt{b} \left\{ \arcsin \sqrt{\tilde{r}} + \sqrt{\tilde{r}} \sqrt{1-\tilde{r}} \right\}_{R/b}^1 \\ &= \sqrt{b} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{R}{b}} - \sqrt{\frac{R}{b}} \sqrt{1-\frac{R}{b}} \right\} \end{aligned}$$

* Typischerweise $E \ll V_0$, also $b \gg R \rightarrow \frac{R}{b} \ll 1$

Also das Integral wird $\approx \sqrt{b} \left\{ \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{b}} \right\}$

Also

$$|T|^2 \approx \exp \left\{ -2 \sqrt{\frac{2mV_0 R b}{\hbar^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{b}} \right) \right\} \approx e^{-\pi \sqrt{\frac{2mV_0 R b}{\hbar^2}}}$$

Nennen wir $G \equiv \pi \sqrt{\frac{2mV_0 R b}{\hbar^2}}$

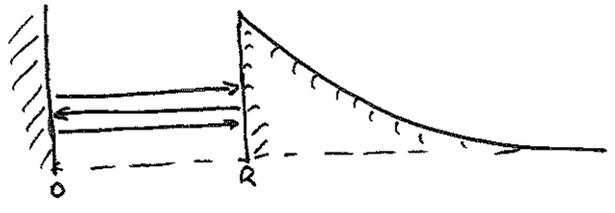
Also $|T|^2 \approx e^{-G}$

Das ist die Wahrscheinlichkeit für das Tunnel bei einem einzigen Stoß gegen den Wall von innen.

• Somit wird die Anzahl von Stößen, die zu einem Tunnelprozess führen $n \approx e^G$ sein

+ Die Zeit zwischen 2 Stößen ist $\sim \frac{2R}{v}$, wobei v die Geschwindigkeit des α -Teilchens ist:

$$E_\alpha = \frac{1}{2} m v^2$$



Damit wird die Lebensdauer gegen α -Zerfall bestimmt:

$$\tau \approx \frac{2R}{v} e^G$$



$$\tau \approx 2R \sqrt{\frac{m}{2E_\alpha}} e^{-\frac{2\pi V_0 R}{\hbar} \cdot \sqrt{\frac{m}{2E_\alpha}}}$$

Natürlich ist das Modell sehr grob, aber diese Formel weist eine recht bemerkenswerte Übereinstimmung mit den experimentellen Daten auf.

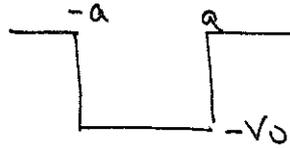
• Die Lebensdauern kann sehr unterschiedlich sein:

z. B. $^{223}\text{Th} \rightarrow 1,3 \times 10^{10}$ Jahre

aber $^{212}\text{Po} \rightarrow 3,0 \times 10^{-7}$ sek.

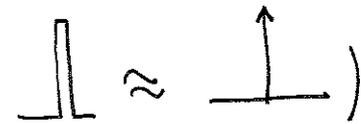
ⓐ DELTA - POTENTIALIALE

* Nehmen wir ein Potentialgraben

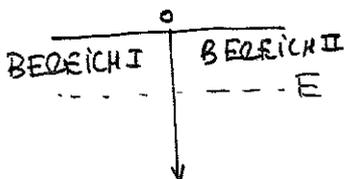


Wenn wir für den Potentialgraben den Grenzfall sehr großer Tiefe ($V_0 \rightarrow \infty$) und nach Null gehender Breite ($a \rightarrow 0$) wählen, wobei $V_0 a$ endlich bleibt, wir bekommen ein δ -Potential



(Note: ~~Wichtig~~ für ein Potentialwall  \approx 

* Wir beschäftigen uns mit der negativen δ .
Wir sind nun an Lösungen mit $E < 0$ interessiert.
Das ist im Prinzip möglich weil mein Potential ist negativ.



Also die entsprechende \pm -unabhängige Schröd.-Gleichung ist

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - k^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a} \delta(x) u(x)$$

wobei $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$

Überall außer an $x=0 \rightarrow \frac{d^2 u}{dx^2} = k^2 u(x)$

mit Lösungen: $u_I(x) = e^{+kx} \quad x < 0$
 $u_{II}(x) = e^{-kx} \quad x > 0$

- * Die Wellenfunktion muß an $x=0$ stetig sein (das ist natürlich den Fall)
- * Die Ableitung ist aber nicht stetig (wir haben schon darüber diskutiert):

$$u_{II}'(0) - u_{I}'(0) = -\frac{\lambda}{a} u(0)$$

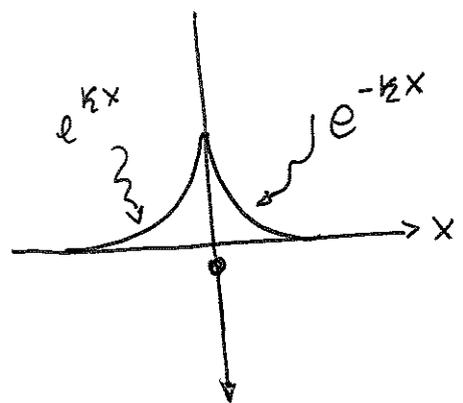
also, da $u_I(x) = \kappa e^{\kappa x} \rightarrow u_I'(0) = \kappa$
 $u_{II}(x) = -\kappa e^{-\kappa x} \rightarrow u_{II}'(0) = -\kappa$

dann $-2\kappa = -\frac{\lambda}{a} \rightarrow \kappa = \frac{\lambda}{a}$

Also ~~ein~~ negatives δ -Potential erlaubt ein einziges Zustand mit $E < 0$, und zwar mit

Energie
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda^2}{a^2}$$

Die entsprechende Eigenfunktion sieht so aus



(NOTE: Für ein Potential $V(x) = -V_0 \delta(x)$ hatten wir die Konstante $\lambda = \frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} = \frac{2m(V_0 a)}{\hbar^2} a$ $\begin{matrix} V_0 \rightarrow \infty \\ a \rightarrow 0 \\ \rightarrow \text{endlich} \end{matrix} \rightarrow 0$

Für $\lambda \rightarrow 0$ zeigt das Potential $V(x)$ eine einzige (gerade) Lösung. Das ist genau was wir hier bekommen!)

- * Die Idee um δ -Potentialen ist natürlich eine Idealisierung, aber für viele Fälle (wo das Potential sehr schmal ist) ist ein δ -Potential sehr nützlich, da die Rechnungen deutlich vereinfacht werden. Wir werden sofort die Idee um δ -Potentialen benutzen.

⑤ DAS KRONIG-PENNEY-MODELL

* Wir werden nun ein sehr einfaches Modell sehen, das uns erläutern wird, wichtige Eigenschaften der Physik von Metalle zu verstehen. Diese Eigenschaften (wie z.B. die Band-Struktur) sind entscheidend für die Festkörperphysik.

* Metalle haben eine kristalline Struktur, d.h. die Metall-Ionen sind räumlich periodisch angeordnet.



Diese Ionen erzeugen ein periodisches Potential für die Elektronen im Metall.

Diese Periodizität hat sehr wichtige Folgen.

* Also das Potential $V(x)$ ist periodisch $\Rightarrow \boxed{V(x+a) = V(x)}$

Der ganze Hamilton-Operator ist invariant gegen die Verschiebung $x \rightarrow x+a$.

* Eine beobachtbare physikalische Größe wird sich deswegen in x und in $x+a$ gleich groß ergeben, d.h. man kann nicht sagen, ob eine Beobachtung an der Stelle x oder $x+a$ stattgefunden hat.

Das bedeutet für die ^{Eigen}Wellenfunktionen, daß $|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2$

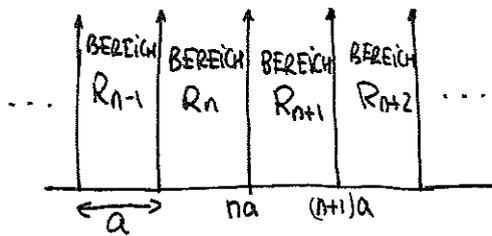
* Also $\psi(x+a)$ und $\psi(x)$ unterscheiden sich nur in einer Phase

$$\psi(x+a) = e^{i\varphi} \psi(x)$$

* Das gilt für alle Potentialen mit Periodizität a .

Wir werden nun ein einfaches Modell lernen, das uns die Rechnungen deutlich vereinfachen wird.

- * Wir wählen als periodisches Potential eine unendliche Reihe von positiven Delta-Funktionen (also abstoßende Potentialspitzen):



$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)$$

- * Außerhalb der Punkte $x=na$ haben wir $V=0$, d.h. Teilchen in freiem Raum, also zwischen den Spitzen haben wir Lösungen der Form $\sin kx$, $\cos kx$.

- * Zwischen $(n-1)a \leq x \leq na$ (also im Bereich R_n in der Abbildung) haben wir z.B.

$$\psi_n(x) = A_n \sin k(x-na) + B_n \cos k(x-na)$$

und in Bereich R_{n+1} :

$$\psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin k(x-(n+1)a) + B_{n+1} \cos k(x-(n+1)a)$$

- * Die Wellenfunktion muß stetig sein, also in $x=na$

$$\psi_n(na) = \psi_{n+1}(na)$$

$$\text{Also } \boxed{B_n = -A_{n+1} \sin ka + B_{n+1} \cos ka} \quad (1)$$

- * Was passiert nun mit der 1. Ableitung der Wellenfunktion? In $x=na$ haben wir ein δ -Potential. Wir haben schon gesagt, daß für ein δ -Potential ist die 1. Ableitung nicht stetig $\implies \psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} \right] \psi_n(na)$

Also: $\psi'_n(x) = k A_n \cos k(x-na) - k B_n \sin k(x-na)$

Dann: $\psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na) = k A_{n+1} \cos ka + k B_{n+1} \sin ka - k A_n =$
 $= \frac{\lambda}{a} \psi_n(na) = \frac{\lambda}{a} B_n$

Also $\boxed{k A_{n+1} \cos ka + k B_{n+1} \sin ka - k A_n = \frac{\lambda}{a} B_n}$ (2)

Aus Gleichungen (1) und (2) bekommen wir $\left(\begin{array}{l} \text{wir definieren} \\ g \equiv \frac{\lambda}{ak} \end{array} \right)$

$$A_{n+1} = A_n \cos ka + (g \cos ka - \sin ka) B_n \quad (3)$$

$$B_{n+1} = (g \sin ka + \cos ka) B_n + A_n \sin ka \quad (4)$$

* Wir haben schon gezeigt, daß für periodische Potentiale (mit Periodizität a) $\psi(x+a) = \psi(x) e^{i\phi}$

Dann $\psi_{n+1}(x)$ hat dieselbe Form wie $\psi_n(x)$ außer eine Phase $e^{i\phi}$

Also $A_{n+1} = A_n e^{i\phi}$

$B_{n+1} = B_n e^{i\phi}$

Dann aus Gleichungen (3) und (4) bekommen wir (wenn wir $\frac{(3)}{(4)}$ machen)

$$(e^{i\phi} - \cos ka)(e^{i\phi} - g \sin ka - \cos ka) = \sin ka (g \cos ka - \sin ka)$$

Also $e^{2i\phi} - e^{i\phi} (2 \cos ka + g \sin ka) + 1 = 0$

$$\cos \phi = \cos ka + \frac{g}{2} \sin ka$$

* Nun werden wir periodische Randbedingungen fordern

$$\psi \text{ in Bereich } R_{n+N} = \psi \text{ in Bereich } R_n$$

Dann $e^{iN\phi} = 1$ (Ich erinnere euch, daß $\psi_{R_{n+1}} = e^{i\phi} \psi_{R_n}$
also $\psi_{R_{n+2}} = e^{2i\phi} \psi_{R_n}$, ..., $\psi_{R_{n+N}} = e^{iN\phi} \psi_{R_n}$)

Dann $N\phi = 2\pi \rightarrow \phi = \frac{2\pi}{N}$ ↑ von Breite Na

Sei $q = qa \rightarrow q = \frac{2\pi}{Na}$ ↗ Erlaubte Werte der Wellenzähle in einem Potentialkasten mit periodischen Randbedingungen (Übung auf dem 2. Blatt).

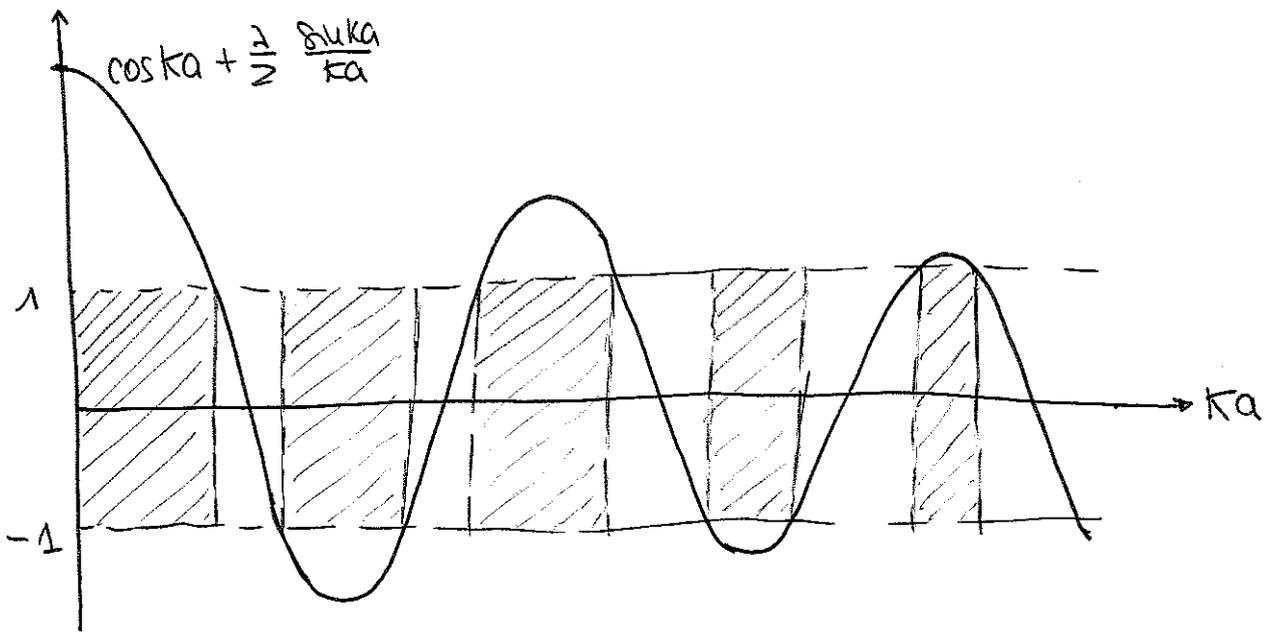
* Also $\cos qa = \cos ka + \frac{1}{2} \frac{\sin 2ka}{ka}$

* Und aufpassen. Wir wissen, daß $|\cos qa| \leq 1$ immer

Das bedeutet, daß nur Werte von E solche daß

$$\left| \cos ka + \frac{1}{2} \frac{\sin 2ka}{ka} \right| \leq 1 \text{ möglich sind. Am Besten sieht}$$

man das graphisch:



- Das ist sehr interessant \rightarrow in demjenigen (ka) -Bereich, wo die Kurve $\left[\cos ka + \frac{\gamma}{2} \frac{\sin ka}{ka} \right]$ außerhalb der Grenzen ± 1 liegt, gibt es keine Lösung. Dies sind verbotene Zonen für k und damit auch für E . Dies sind die sogen.

ENERGIELÜCKE (auf Englisch Energy Gaps)

- Wo die Kurve innerhalb der Grenzen ± 1 liegt, gibt es erlaubte Lösungen. Diese erlaubte Lösungen bauen (ganz klar aus der Abbildung) Energiebänder.

* Es gibt also abwechselnd erlaubte Energiebänder und verbotene Zonen. Sowas ist eine allgemeine Eigenschaft des periodischen Potential (also ist es nicht spezifisch um dem Kronig-Penney Potential).

* Wie schon erwähnt, Metalle haben eine kristalline (periodische) Struktur von Ionen. Die Elektronen in einem Metall fühlen deswegen ein periodisches Potential, und deswegen die mögliche Energien eines Elektrons in einem Metall zeigen auch Energiebänder und Energielücke.

Deswegen sind diese Ideen entscheidend für die Festkörperphysik!