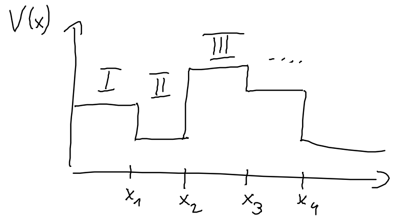
3 Teilchen an Potentialstufe

3.1 Eigenschaften der Wellenfunktion

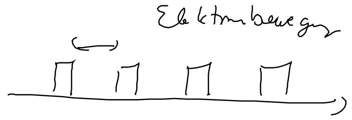


$V(x)$ = stückweise konstant

(1. dim Fall)

Anwendungen in Festkörper / Kernphysik,

z. B. periodische Anordnung von Ionen →



Atomkern als ein Potentialtopf usw →

Station S-Gl:

$H\psi = E\psi$: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$

gesucht ψ, E.

Anforderung an ψ bei $x_1 = a$ ← Stelle der Stufe

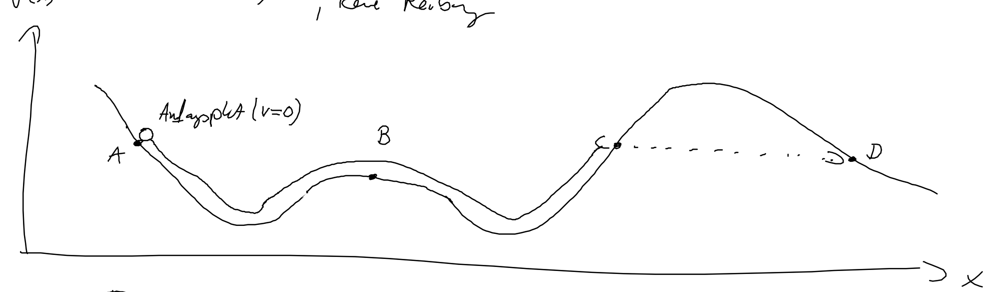
$\psi(x)$, $\psi'(x)$ sind stetig

$$\boxed{\begin{array}{l} 1)\ \psi_{I}(a) = \psi_{II}(a) \qquad 2)\ \psi_{I}'(a) = \psi_{II}'(a) \\ \text{Stetigkeits bed. f. Wellenfkt. im stückweise konstanten Potential} \end{array}}$$

Lsg der Schrödingergl. $\psi'' = -\frac{2m}{\hbar}(E - V(x))\psi(x)$ können durch Freiteilchenlösungen u. Stetigkeitsbed ~~..~~ bestimmt werden.

3.2 Wiederholung: klassisches Teilchen in Potentiallandschaft

Potential: $V(x)$, keine Reibung



$E_A > E_B$ $\qquad$ $E_A = E_C$ $\qquad$ $E_A = E_D$

$A \rightarrow B \rightarrow C \not\rightarrow D$

„zurückrollen" klassisch verbotener Übergang.

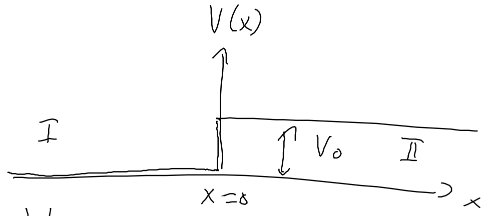
Quantenmech.: $\leftrightarrow$ D erlaubt (quantenmech. Tunneleffekt)

diskutieren jetzt verschieden Anwendungsbeispiele solcher Potentiale

3.3 Einzelne Potentialstufe

(einfachste Untersuchung, damit kann man das math. Verfahren gut verstehen)

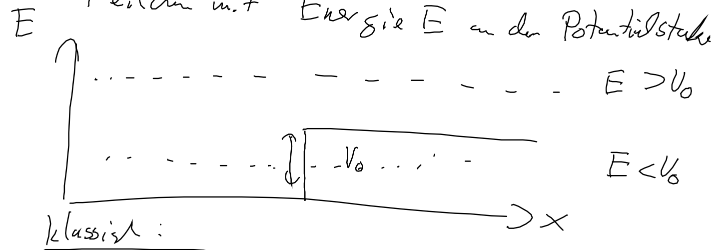
$$V(x) = V_0\,\Theta(x), \qquad \Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



Sprungstelle im Potential

Was würde man klassisch erwarten?

Teilchen mit Energie E an der Potentialstufe



klassisch:

1) $E < V_0 \rightarrow$ Teilchen kann nicht über die Stufe gelangen (Reflexion)

2) $E > V_0 \rightarrow$ Teilchen gelangt über die Stufe (Transmission)

Was sagt die QM zu diesem Teilchen? Lsg. stat. Schrödingergl.

Bereich I: $\left(-\frac{\hbar^2\psi''}{2m} + V\psi = E\psi\right)$

$V = 0$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

Bereich II:

$$\psi'' = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi$$

geht so nur für „stückweise konstante" Potentiale

Lsg der beiden Bereiche müssen bei $x=0$ stetig sein:

$$\left(\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)\right)$$

a) Teilchen oberhalb der Potentialstufe

$\boxed{E > V_0}$ (klassisch passiert das Teilchen die Schwelle)

Bereich I: $\psi'' = -k^2\psi$, $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$

Bereich II: $\psi'' = -q^2\psi$, $q = \pm\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

beide Gleichungen sind Schwingungsgl.:

I: $e^{\pm ikx}$ II: $e^{\pm iqx}$ (Freiteilchen)

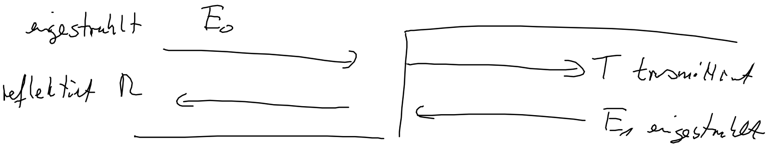
(Dgl. 2. Ordnung: 2 Lsg als Fundamentalsystem, Gesamtlösung aus beiden zusammensetzen)

<u>Ansatz:</u>

$$\left.\begin{aligned}\psi_I &= E_0\, e^{ikx} + R\, e^{-ikx}\\ \psi_{II} &= E_1\, e^{-iqx} + T\, e^{iqx}\end{aligned}\right\}$$

linear kombinieren mit unbekannten Konstanten E_0, E_1, R, T

<u>Interpretation:</u>



E_0: wird $\frac{1}{\sqrt{L}}$ über Normierung der Wellenfunktion

E_1: Annahme, dass Teilchen von links einläuft ($E_1 = 0$ kein Teilchen von rechts)

R, T: bestimmen.

Stetigkeitsbed.: bei $x = 0$ für R und T:

(i) Stetigkeit der Wellenfkt.: $\boxed{\frac{1}{\sqrt{L}} + R = T}$

(ii) Stetig der Ableitung: $\boxed{ik\left(\frac{1}{\sqrt{L}} - R\right) = iqT}$

insgesamt Lösung des Gleichungssystems:

$$\boxed{T = \frac{2k}{\sqrt{L}\,(q+k)}}$$

Transmissionkoeffizient als Fkt von q, k bzw. V_0, E

weiterhin

$$\boxed{R = \frac{k-q}{\sqrt{L}\,(k+q)}}$$

Reflektionskoeffizient.

Damit ist $\psi(x)$ vollständig bestimmt! $R = \frac{\hat{R}}{\sqrt{L}}$ $T = \frac{\tilde{T}}{\sqrt{L}}$

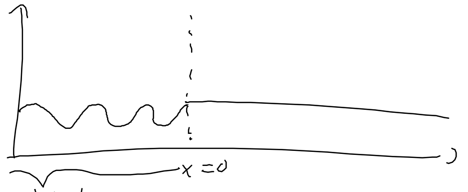
– Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$|\psi_I|^2 = \frac{1}{L}\left(1 + |\hat{R}|^2 + 2\hat{R}\,\underbrace{\cos(2kx)}_{\text{oszillierender Anteil}}\right)$$

Schwebung aus Reflektierter und eingestrahlter Wellen

$$|\psi_{II}|^2 = \frac{|T|^2}{L} = \text{konstant}$$

$|\psi(x)|^2$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit



Interferenz zw. einlaufender und reflektierter Welle

Wahrscheinlichkeitsdichte mit der das Teilchen die Potential überwindet

- Stromdichten $j(x)$

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi\right)$$

einsetzen von ψ_I und ψ_{II} ergibt:

$$\boxed{j_I = \frac{\hbar k}{m}\left(1+|R|^2\right)} \quad \text{und} \quad \boxed{j_{II} = \frac{\hbar q}{m}|T|^2}$$

Stromdichte in 1D in I

Stromdichte in Bereich II

Reflexionskoeffizient

$$r = \frac{j_{ref}}{j_{ein}} = |R|^2 = \left|\frac{k-q}{k+q}\right|^2 \neq 0 \quad \text{f. } q \neq k$$

Transmissionskoeffizient

$$t = \frac{j_{trans}}{j_{ein}} = \frac{q}{k}|T|^2 = \frac{q}{k}\left(\frac{2k}{k+q}\right)^2 \neq 0$$

$(\hbar q = \sqrt{2m(E-V_0)}$ und $\hbar k = \sqrt{2mE}$ $\quad E > V_0$!)

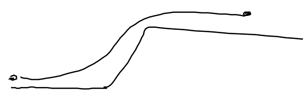
Bemerkungen: $(E > V_0)$

- Quantenmechanisch:
Teilchen wird an der Stufe mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit reflektiert (Interferenzen)

klassisch:

$$\underset{\frac{m}{2}v_I^2}{E_I} = V_0 + \underset{\frac{m}{2}v_{II}^2}{E_{II}}$$

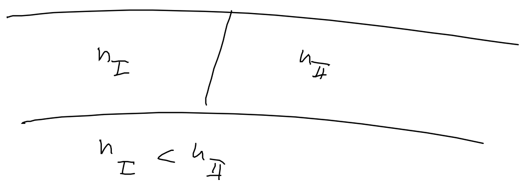
$E > V_0$



$v_I > v_{II}$

Teilchen passiert die Potentialstufe und bewegt sich mit geringer Geschwindigkeit

- Die quantenmech. Reflexion ist ein typ. Wellenphänomen, analog zu Licht:



$n_I < n_{II}$

$$\frac{c}{n_I} > \frac{c}{n_{II}}$$

Verringerung der Lichtgeschwindigkeit bei Passieren einer Brechzahlstufe und Interferenzphänomen

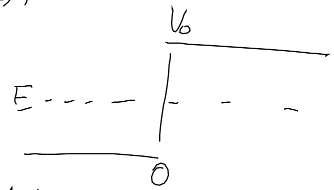
– klassischer Grenzfall: $E \gg V_0$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \approx q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$$

$$R = \frac{k-q}{k+q} \to 0 \quad , \quad T = \frac{2k}{k+q} \to 1$$

Es existiert keine reflektierte Welle $(R=0)$,
d.h. der Grenzfall der klass. Mechanik.

b) Teilchen unterhalb der Potentialstufe



$\boxed{E < V_0}$ klassisch: „Abprallen des Teilchens" u. zurückrollen.

Bereich I: $\psi'' = -k^2\psi$, $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$

Bereich II: $\psi'' = \varkappa^2\psi$, $\varkappa = \pm\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

$\varkappa = \pm i\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar = \pm iq$

Man kann die Lsg von Teil a) $(E > V_0)$ verwenden, wenn man $k \equiv \pm iq$ setzt $(q = \mp ik)$

Lösung:

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(e^{ikx} + \hat{R}\, e^{-ikx}\right)$$

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{L}}\hat{T} e^{iqx} = \frac{1}{\sqrt{L}}\hat{T}\, e^{-\varkappa x} \qquad \left(- \text{ Lsg ist nicht normierbar } e^{+\varkappa x}\right)$$

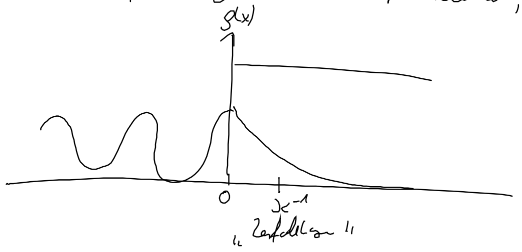
$$\hat{R} = \frac{k-i\varkappa}{k+i\varkappa} \quad , \quad \hat{T} = \frac{2k}{k+i\varkappa}$$

Bemerkungen

– Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$:

Quantenmech. erlaubt ein Eindringen des Teilchens in die Potentialschwelle, da
$\psi_{II} = \frac{\hat{T}}{\sqrt{L}}e^{-\varkappa x} \neq 0$ bzw. $\rho(x) = \frac{|\hat{T}|^2}{L}e^{-2\varkappa x} \neq 0$ ist.

ψ bzw ρ klingen exponentiell ab, aber $\neq 0$



(einige Teilchen werden bei einem Exp. im Potentialwall zu finden sein!)

- es gibt kein Fluß in die Stufe:
  Teilchenstrom nach rechts verschwindet

$$\vec{j}_{II} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{II}^{*}\left(\nabla\psi_{II}\right) - \psi_{II}\left(\nabla\psi_{II}^{*}\right)\right) = 0$$

ist reell $\sim |T|^2 e^{-2\varkappa r}$

- Grenzfall unendlich hoher Potentialschwelle:
  $V_0 \to \infty$: (siehe der Potentialtopf ∞ hoch)

$$\varkappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \to \infty$$

$$\tilde{T} = \frac{2k}{k+i\varkappa} \to 0$$

$$\tilde{R} = \frac{k-i\varkappa}{k+i\varkappa} \to -1$$

$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) \to \psi_I(0) = 0$$

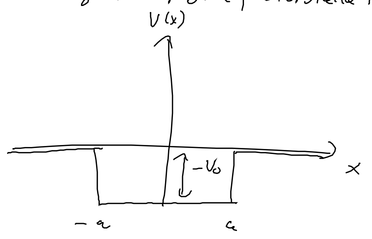
Die Stetigkeitsbed. bei einer unendlich hohen Stufe.

3.4 Potentialtopf

Modellsystem f. kurzreichweitig (Kernphysik, Störstelle FK, große Moleküle)

Potentialverlauf:

$$V(x) = -V_0\,\Theta(a-|x|) \quad \begin{pmatrix} 1: a>|x| \\ 0: a<|x| \end{pmatrix}$$



anschaulich: gebundene (am Topf lokalisierte Zustände) und ungebundene Zustände

- gebunden werden Teilchen je höher die Masse m ist und je tiefer der Topf V_0 ist bzw. je breiter, Grenzfall: ∞ tiefer Topf, alle gebunden.

- gebunden: $-V_0 \leq E \leq 0$, ungebunden $E > 0$