Kapitel 4

Eindimensionale Potentialprobleme

Wir werden nun die <u>Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung für eini-</u> <u>ge einfache Potentialprobleme</u> lösen. Wir betrachten ein <u>spinloses</u> Teilchen der Masse *m*, das sich in einem Potential bewegen kann. <u>Das Potential sei</u> <u>zeitunabhängig (Stationärer Fall)</u>. Der Hamiltonoperator ist dann nach Gl. (3.10)

$$\hat{H}=rac{ec{P}^2}{2m}+\hat{V}(\hat{ec{Q}})$$

und die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion lautet (3.31)

$${
m i}\hbarrac{\partial}{\partial t}\,\psi(ec x,t)\,=\,-rac{\hbar^2}{2m}\,
abla^2\,\psi(ec x,t)\,+\,V(ec x)\,\psi(ec x,t)\,.$$
 Differentialgleichung in Raum und Zeit

Wir behandeln die Schrödingergleichung, indem wir zunächst die <u>Eigen-</u> wertgleichung von \hat{H} (stationäre Schrödingergleichung 3.36)

$$\hat{H} \ket{\psi_n} = E_n \ket{\psi_n}$$

lösen. Sie <u>unterscheidet sich von der vollen zeitabhängigen Schrödinger</u>gleichung

$$\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)
angle = \hat{H} |\psi(t)
angle$$

dadurch, dass sie sich auf Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ bezieht und dass i $\hbar \frac{d}{dt}$ durch E_n ersetzt ist. Die stationäre Schrödingergleichung im Ortsraum erhalten wir daher, indem wir in obiger zeitabhängiger Schrödingergleichung $\psi(\vec{x}, t)$ durch $\psi_n(x)$ ersetzen und i $\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ durch E_n .

4.1. Randbedingungen für die Wellenfunktion

STATIONÄRE SCHRÖDINGERGLEICHUNG IM ORTSRAUM
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x}) \qquad (4.1)$$

(Man beachte, dass E_n , der Eigenwert des Hamilton-Operators zum Eigenzustand $|\psi_n\rangle$, nicht vom Ort abhängen kann.) Diese Gleichung werden wir im Folgenden in einigen einfachen eindimensionalen Fällen lösen.

Wie wir in Kap. 3.4 gesehen haben, besitzen die Eigenzustände die einfache Zeitabhängigkeit $|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\psi_n(0)\rangle$, d.h. im Ortsraum

$$\psi_n(\vec{x},\underline{t}) = e^{-\frac{1}{\hbar}E_n t} \psi_n(\vec{x},\underline{0}) .$$
(4.2)

Die **allgemeine** Lösung der Schrödingergleichung ist eine Linearkombination der Eigenfunktionen, im Allgemeinen mit unterschiedlichen Energien und somit unterschiedlichen Zeitentwicklungen (s.S. 68). Diese Linearkombination ist so zu wählen, dass die jeweiligen *Anfangsbedingungen* erfüllt sind. Die Gesamtenergie *E* des Zustands erhält man als Erwartungswert des Hamiltonoperators.

4.1 Randbedingungen für die Wellenfunktion

und Nebenbedingungen

Zuerst leiten wir Randbedingungen der Ortsraum-Wellenfunktion für die *Eigenzustände* von \hat{H} her.

4.1.1 Normierbarkeit, Spektrum

In der klassischen Mechanik ist ein Teilchen *gebunden*, wenn seine Energie kleiner ist als der Wert $V(x \rightarrow \infty)$ des Potentials im Unendlichen (wenn dieser Grenzwert existiert). Seine Bewegung ist dann auf einen endlichen räumlichen Bereich beschränkt. Wenn die Energie größer ist, kann das Teilchen ins Unendliche entkommen.

In der Quantenmechanik ist die Situation im Wesentlichen dieselbe, man muss sie aber etwas anders formulieren.

Gebundene Zustände

Bei gebundenen Zuständen ist die <u>Wahrscheinlichkeit</u>, das Teilchen "im <u>Unendlichen"</u> anzutreffen Null. Genauer:

Gebundene Zustände sind normierbare Eigenzustände von \hat{H} .

Wegen der unitären Zeitentwicklung $\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \psi(\vec{x}, 0)$ bleibt die Normierung für alle Zeiten erhalten. Aus der Normierbarkeit folgt

wobei *D* für die Dimension des jeweiligen Problems steht (D=1,2,3). Weil das Integral über den Radialanteil konvergiert, gilt:

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\vec{x})|^2$, ein Teilchen in einem "gebundenen Zustand" anzutreffen, fällt bei großen r mindestens wie r^{-D} ab.

Man kann zeigen:

Das Energiespektrum von gebundenen Zuständen ist diskret.

Beispiel: Die gebundenen Zustände von Elektronen in einem Atom.

Spezialfall: Ein Eigenzustand, dessen Wellenfunktion auf ein endliches Volumen beschränkt ist. In einem endlichen Volumen ist der Hilbertraum abzählbar (diskrete Wellenzahlen). Deswegen folgt dann sofort, dass das Energiespektrum diskret sein muss.

s.S. A65

Man kann auch zeigen, dass der *Erwartungswert des Impulsoperators in einem gebundenen Zustand Null ist*. Dies ist plausibel, weil gebundene Zustände im Wesentlichen in einem endlichen Volumen lokalisiert sind.

4.1. Randbedingungen für die Wellenfunktion

Ungebundene Zustände (Streuzustände)

Ungebundene Zustände sind *nicht normierbare* Eigenzustände von \hat{H}

Sie beschreiben Teilchen, die sich ausbreiten, zum Beispiel in der Art einer (nicht normierbaren) ebenen Welle. Diese Streuzustände selber sind nicht physikalisch realisierbar. Durch Linearkombination von ebenen Wellen kann man normierbare Wellenpakete konstruieren, die physikalisch realisierbar sind. Diese Linearkombinantionen sind aber keine Eigenzustände von \hat{H} . Rechnungen kann man oft leichter mit ebenen Wellen durchführen als mit Wellenpaketen. Es gilt:

Das Energiespektrum von ungebundenen Zuständen ist kontinuierlich.

Beispiel: die Ionisationszustände eines Atoms. Wir werden ungebundene Zustände später näher besprechen.

4.1.2 Stetigkeit

Wir behandeln zunächst den eindimensionalen Fall. Die Aussagen gelten entsprechend auch in drei Dimensionen (s.u.).

1) Die Wellenfunktion $\psi(x)$ ist immer stetig.

Beweis per Widerspruch: Wir betrachten

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \left(\frac{d}{dx}\psi(x)\right) \, \mathrm{d}x = \psi(x_0+\varepsilon) - \psi(x_0-\varepsilon) \, .$$

Wir lassen zunächst auch unstetige Wellenfunktionen wie z.B. $\psi(x) = \Theta(x)$ mit der Ableitung $\psi'(x) = \delta(x)$ zu. Die Verwendung der Ableitung in der Gleichung impliziert selber daher noch nicht die Stetigkeit von $\psi(x)$.

Wäre ψ unstetig bei x_0 , so würde die rechte Seite für $\varepsilon \to 0$ nicht verschwinden. Dann müsste in der Tat $\frac{d}{dx}\psi(x) \propto \delta(x-x_0)$ gelten, wodurch aber die kinetische Energie divergieren würde:

$$E_{kin} = \langle \psi | \frac{P^2}{2m} | \psi \rangle \qquad (\text{Erveloped})$$

$$= = \frac{+\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \psi^*(x) \right) \cdot \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right) dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dx} \psi(x) \right|^2 dx$$

$$\propto \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \cdot \delta(x - x_0) dx = \delta(0) = \infty$$

$$(6)$$

Einen Zustand mit unendlicher kinetischer Energie kann man nicht erzeugen, daher muss für alle physikalisch realisierbaren Zustände die Wellenfuntion $\psi(x)$ überall stetig sein.

15.4.2021

2) Die Ableitung $\frac{d\psi}{dx}$ ist bei endlichen Potentialen stetig.

Wir integrieren die Schrödingergleichung von $x_0 - \varepsilon$ bis $x_0 + \varepsilon$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x)\,dx\,+\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}V(x)\psi_n(x)\,dx\,=\,E_n\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\psi_n(x)\,dx\,.$$

Die rechte Seite ist von der Ordnung $O(\varepsilon)$, da $\psi(x)$ keine δ -Beiträge besitzt, denn sonst würde die kinetische Energie erst recht divergieren. Somit gilt

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left(\psi_n'(x_0 + \varepsilon) - \psi_n'(x_0 - \varepsilon) \right) = + \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} V(x) \psi_n(x) \, dx \, .$$

Wenn V(x) überall endlich ist, verschwindet hier die rechte Seite. Daher ist $\frac{\partial}{\partial x}\psi_n(x)$ stetig.

Ein unendlich großes Potential ist physikalisch eigentlich nicht realisierbar. Um Rechnungen wesentlich zu vereinfachen, betrachtet man aber oft statt eines realisierbaren sehr großen Potentials in der Rechnung einen unendlich großen Wert (Beispiel in Kapitel **2**).

3) Sprung der Ableitung von ψ bei Potentialen mit δ -Anteil

<u>Wenn</u> V(x) einen δ -Funktionsbeitrag $V(x) = C \cdot \delta(x - x_0)$ + (endliche Anteile) enthält, dann gilt

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} V(x)\,\psi(x)\,dx \ \to \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} C\cdot\delta(x-x_0)\,\psi(x)\,dx \ = \ C\,\psi(x_0)$$

Ein solches Potential wird z.B. verwendet, um Potentialbarrieren auf rechnerisch einfach Art zu beschreiben. Damit wird aus Gl. (??) ein Sprung in der Ableitung von $\psi(x)$:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left(\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) \right) = \frac{2m}{\hbar^2} C \psi(x_0)$$
(4.3)

4) Die Wellenfunktion verschwindet bei unendlichem Potential

Wenn $V(x) = \infty$ in einem Intervall $x \in (x_a, x_b)$, dann verschwindet die Wellenfunktion in diesem Intervall, <u>da sonst die potentielle Energie des</u> Teilchens unendlich wäre.

5) Unstetigkeit von $\frac{d\psi}{dx}$ am Rand eines unendlichen Potentials

Wenn $V(x) = \infty$ in einem Intervall $x \in (x_a, x_b)$, dann ist zwar die Wellenfunktion Null im Intervall, und überall stetig, aber die Ableitung wird in der Regel an den Grenzen des Intervalls unstetig sein.

Randbedingungen dreidimensionaler Probleme

Aus ähnlichen Überlegungen folgt ebenso in drei Dimensionen, dass die Wellenfunktion und deren partielle Ableitungen überall stetig sein müssen, wenn das Potential überall endlich ist. Weitere allgemeine Eigenschaften der Wellenfunktion werden wir später besprechen.

eine

(4.4)

Konstantes Potential 4.2

Besonders wichtig bei Potentialproblemen ist der Fall, dass das Potential in einem Intervall konstant ist. Wir behandeln das eindimensionale Problem. Es sei also

 $V(x) = V_0 =$ konst. für a < x < b.

In diesem Intervall wird dann die Schrödingergleichung Gl. (4.1) zu

$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) =(E-V_0)\psi(x)$	Die Schrödingergleichung ist eine Differentialgleichung, die LOKAL das Verhalten der Wellenfunktion
	beschreibt

Eigenwertgl.: wir erhalten die Eigenfunktionen und Eigenenergien von H

(Schwingungsgleichung), mit der allgemeinen Lösung = Wellengleichung



Diese drei Lösungen sind äquivalent !

Wenn $E < V_0$, dann ist κ reell, und die Formulierung der ersten Zeile ist bequem. Die Wellenfunktion $\psi(x)$ hat dann im Intervall [a, b] i.a. exponentiell ansteigende und abfallende Anteile !

Wenn $E > V_0$, dann ist k reell, und die zweite oder dritte Zeile sind, je nach Randbedingugen, bequeme Formulierungen. Die Wellenfunktion zeigt dann im Intervall [a, b] oszillierendes Verhalten.

4.3 Gebundene Zustände im Potentialtopf

Ein Potentialtopf beschreibt in idealisierter Form eine Region, in der ein Teilchen gefangen ist, z.B. einen dotierten Bereich in einem Halbleiter.

4.3.1 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Wir behandeln zunächst einen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden:



Abbildung 4.1: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Es gibt hier die drei skizzierten, qualitativ verschiedenen Teilgebiete. Eine oft sinnvolle Strategie bei solchen Potentialproblemen ist, zuerst allgemeine Lösungen für die Wellenfunktion in den Teilgebieten zu finden, und diese dann mit den Randbedingungen geeignet zusammenzusetzen.

Die Energie *E*, d.h. der Eigenwert von \hat{H} , ist *nicht* ortsabhängig !

Für den unendlich hohen Potentialtopf finden wir:

<u>Gebiete I & III:</u> Hier ist $V(x) = \infty$ und daher $\psi(x) \equiv 0$, da sonst

$$E_{pot} = \int V(x) |\psi(x)|^2 dx = \infty$$

Gebiet II: Hier ist das Potential konstant.

Kapitel 4. Eindimensionale Potentialprobleme

Auch für $E = V_0$

<u>1. Versuch</u>: Wir setzen $E < V_0 = 0$ an und verwenden Gl. (4.5a):

$$\psi(x) = a e^{\kappa x} + b e^{-\kappa x}$$

mit reellem $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}.$

Die Stetigkeit der Wellenfunktion bei x = 0 verlangt $\psi(0) = 0$, also a = -b. Die Stetigkeit bei x = L verlangt $\psi(L) = 0$, somit $e^{\kappa L} - e^{-\kappa L} = 0$. Daraus folgt $\kappa = 0$ und damit $\psi(x) = a(e^0 - e^0) \equiv 0$. Wir finden also keine Lösung mit $E < V_0$! Später werden wir allgemein sehen, dass bei gebundenen Zuständen die Energie E immer größer als das Minimum des Potentials sein muss.

Kap. 4.6

<u>2. Versuch</u>: Wir setzen $E > V_0$ an und verwenden (wegen der Randbedingungen) Gl. (4.5c):

$$\psi(x) = a \sin kx + b \cos kx$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

$$(4.6)$$

mit

Die Wellenfunktion muss mehrere Bedingungen erfüllen:

1. Die <u>Stetigkeit der Wellenfunktion</u> ergibt hier die Randbedingungen $\psi(0) = 0$ und $\psi(L) = 0$, und daher

$$b = 0$$
$$a\sin(kL) = 0$$

Die zweite Bedingung zusammen mit der Normierung kann nur mit $\sin(kL) = 0$ erfüllt werden, da mit a = 0 die Wellenfunktion wieder identisch verschwinden würde. Also muss $k = \frac{n\pi}{L}$ mit einer ganzzahligen <u>Quantenzahl</u> n gelten, die den gebundenen Zustand charakterisiert. Der Wert n = 0 ist ausgeschlossen, da dann wieder $\psi \equiv 0$ wäre. Wir können uns auf <u>positive</u> n beschränken, denn negative nergeben mit $\sin(-nkx) = -\sin(nkx)$ bis auf die Phase (-1) dieselbe Wellenfunktion.

2. Die Ableitung der Wellenfunktion darf bei x = 0 und x = L beliebig unstetig sein, da dort das Potential unendlich ist. Hieraus erhalten wir im vorliegenden Fall keine weiteren Bedingungen an ψ .

4.3. Gebundene Zustände im Potentialtopf

3. Normierung der Wellenfunktion: Zum einen muss $\psi(x)$ überhaupt normierbar sein, was in dem endlichen Intervall [0, L] kein Problem ist. Zum anderen können wir die Normierungskonstante *a* in Abhängigkeit von der Quantenzahl *n* berechnen:

$$\frac{1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2}{|x|^2}$$

= $|a|^2 \int_0^L dx \sin^2(\frac{n\pi}{L}x)$
= $|a|^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} dy \sin^2 y$ mit $y = \frac{n\pi}{L}x$
= $|a|^2 \frac{L}{n\pi} \frac{n\pi}{2} = |a|^2 \frac{L}{2}$.

Also $|a|^2 = \frac{2}{L}$, mit beliebiger Phase für *a*, welches wir reell wählen.

(In der Regel hängt die Normierungskonstante von n ab; hier nicht)

Insgesamt erhalten wir die

LÖSUNG FÜR EIN TEILCHEN IM UNENDLICH HOHEN POTENTIALTOPF

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x), \ 0 < x < L; \ (\psi(x) = 0 \text{ sonst})$$
 (4.7)

$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$
; $n = 1, 2, ...$ (4.8)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 + V_0$$
(4.9)

Es sind somit hier Energie und Wellenzahl quantisiert, mit nur diskreten möglichen Werten, in Abhängigkeit von der Quantenzahl n. Die Energie nimmt mit n^2 zu und mit $1/L^2$ ab.

In Abbildung (4.2) sind Wellenfunktionen zu den drei tiefsten Eigenwerten dargestellt. Man erkennt, dass die Wellenfunktion des Grundzustands nur am Rand Null wird. Bei jeder Anregung kommt ein weiterer Nulldurchgang ("*Knoten*") hinzu.



Abbildung 4.2: Eigenfunktionen von \hat{H} zu den drei niedrigsten Energie-Eigenwerten. Dies ist eine kombinierte Darstellung. Es sind dünn die Eigenenergien gezeichnet (rechte Achse, $V_0 = 0$), und auf Höhe der Eigenenergien jeweils die Wellenfunktionen. Man beachte, dass für jede Eigenfunktion ein Phasenfaktor (insbesondere das Vorzeichen) beliebig gewählt werden kann.

Kraftübertragung auf die Wände

Die Kraft errechnet sich aus der Energie

$$F = -\frac{dE}{dL} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m} \cdot \frac{2}{L^3} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{mL^3} .$$

tententwickly eines einzelnen Eigenzustands: y (x) → e that y (x) = 14(x,U) zeitlich Konshat! Hereman Wellenfet.: E (n 4n (x) -> E cn e 4n (x) an Rand 150 1 => Ossillationen => Ossillationen in 203(+)

Die Energie eines Zustands ist ein einem breiteren Topf geringer. Deswegen wirkt eine Kraft auf die Wände, die versucht, sie auseinanderzuschieben !

4.3.2 Potentialtopf mit endlicher Tiefe

Wir betrachten nun einen Potentialtopf mit endlicher Tiefe

$$V(x) = \begin{cases} \frac{V_0 < 0}{0} & \text{für } |x| \le \frac{L}{2} \\ \text{sonst} & \end{cases},$$
(4.10)

wie er in Abbildung (4.3) skizziert ist. Wir haben hier den Koordinatenur-



Abbildung 4.3: Potentialtopf endlicher Tiefe.

sprung im Vergleich zum vorherigen Beispiel um $-\frac{L}{2}$ verschoben. Dadurch wird das Potential in x symmetrisch, V(x) = V(-x), und die Rechnungen vereinfachen sich. Wir behandeln in diesem Abschnitt **gebundene Zustände**, das heißt im Fall des vorliegenden Potentials $E \leq 0$. Der andere Fall (E > 0) wird anschließend besprochen. Wir werden bald allgemein zeigen, dass die Energie eines gebundenen Zustands größer als das Potential-Minimum sein muss, insgesamt also hier $V_0 < E \leq 0$.

Wir unterscheiden wieder die drei Bereiche konstanten Potentials, wie in Abbildung (4.3) skizziert. Die Schrödingergleichung lautet bei konstantem Potential

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \,\psi''(x) \,=\, (E-V)\,\psi(x) \;,$$

wie in Abschnitt 4.2 besprochen.

In den <u>Bereichen I und III</u> ist V = 0. Im endlich tiefen Topf ist die Wellenfunktion dort nicht Null ! Die allgemeine Lösung hat jeweils die Form

$$\psi(x) = \underline{A_1 e^{-\kappa x}} + \underline{A_2 e^{+\kappa x}}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$$
(4.11)
(4.11)

mit

und E < 0. Im Bereich I muss $A_1^I = 0$ sein, da die Wellenfunktion ansonsten für $x \to -\infty$ exponentiell anwachsen würde und somit nicht normierbar wäre. Im Bereich III ist analog $A_2^{III} = 0$.

Im <u>Bereich II</u> gilt $V = V_0 < 0$ und die allgemeine Lösung lautet

$$\psi(x) = \underline{B_1 e^{ikx}} + \underline{B_2 e^{-ikx}}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{(E - V_0)}$ (4.12)

Die gesamte Wellenfunktionen ist somit

$$\underline{\psi(x)} = \begin{cases}
A_2^I e^{\kappa x} & ; \ x < -\frac{L}{2} \\
B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & ; \ -\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2} \\
A_1^{III} e^{-\kappa x} & ; \ x > \frac{L}{2}
\end{cases}$$
(4.13)

Den Grenzfall E = 0 müssen wir vorab separat diskutieren. Hierbei ist $\kappa = 0$. Die Wellenfunktion ist dann in den äußeren Bereichen I und III konstant. Die Konstante muss Null sein, da die Wellenfunktion sonst nicht normierbar wäre. Die Ableitung der Wellenfunktion ist dann in den Bereichen I und III ebenfalls Null. Bei $x = \pm \frac{L}{2}$ müssen beide stetig sein. Damit ist das Problem im Bereich II so wie beim Potentialtopfproblem mit unendlich hohen Wänden. Von den Lösungen dieses Problems wissen wir bereits, dass nur die Wellenfunktionen an den Potentialwänden verschwinden, nicht aber ihre Ableitungen. Wenn auch die Ableitung verschwindet, ist die Wellenfunktion komplett Null. Dies ist aber keine physikalisch akzeptable Lösung. Daher gibt es keine Lösung zu E = 0. Wir haben deshalb die Einschränkung $V_0 < E < 0$.

4.3. Gebundene Zustände im Potentialtopf

Wie wir bald zeigen werden, kann man bei einem symmetrischen Potential (V(x) = V(-x)) die Eigenfunktionen von H in symmetrische und antisymmetrische Funktionen trennen. Die Wellenfunktionen lauten dann

Wenn V(x) = V(-x), dann gilt für die EIGENfunktionen: psi_n (-x) = plusminus psi_n (x)

Nun werten wir die <u>Stetigkeitsbedingungen</u> zur Bestimmung der Konstanten aus

$$\frac{\psi_{s}(\frac{L}{2}):}{\psi_{s}(\frac{L}{2}):} = A_{s} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = B_{s} \cos(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{s}(\frac{L}{2}): -A_{s} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = -\frac{k}{\kappa} B_{s} \sin(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{s}(\frac{L}{2}): -A_{a} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = B_{a} \sin(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{a}(\frac{L}{2}): -A_{a} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = B_{a} \sin(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{a}(\frac{L}{2}): -A_{a} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = \frac{k}{\kappa} B_{a} \cos(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{a}(\frac{L}{2}): -A_{b} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} = \frac{k}{\kappa} B_{b} \cos(k\frac{L}{2}) \\ \downarrow_{a}(\frac{L}{2}): -K_{b} e^{-\kappa(\frac{L}{2})} \\ \downarrow_{a}(\frac{L}{2}): -K_{b} e^{-$$

(Bei $x = -\frac{L}{2}$ ergeben sich keine neuen Beziehungen, weil die Symmetrie der Wellenfunktion schon in den Ansätzen für ψ_s und ψ_a genutzt wurde.) Diese beiden Gleichungen liefern die Quantisierungsbedingungen für die erlaubten Energieeigenwerte. Es gibt allerdings keine direkte algebraische Lösung für die Eigenenergien. Man kann sie numerisch bestimmen. Sehr viel mehr ersieht man aber aus einer graphischen Darstellung. Dazu ist es sinnvoll, zu dimensionslosen Größen überzugehen. Wir definieren $\eta = k\frac{L}{2}$ und drücken die Energie *E* durch η aus, mittels Gl. (4.12) und $E - V_0 = |V_0| - |E|$:

$$\eta = k \frac{L}{2} = \frac{L}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{E - V_0}$$

$$\Rightarrow \frac{4}{L^2} \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left(|V_0| - |E| \right)$$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} |E| = \frac{4}{L^2} \left(\frac{mL^2 |V_0|}{2\hbar^2} - \eta^2 \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\kappa L}{2} \stackrel{(4.11)}{\equiv} \frac{L}{2} \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \sqrt{\widetilde{V}_0 - \eta^2}$$

Die Größe \tilde{V}_0 ist ebenfalls dimensionslos. Sie spezifiziert die Tiefe des Potentials in "natürlichen" Einheiten des Systems. Die zur Wellenzahl proportionale Variable η parametrisiert die Lösungen. Der Bereich der erlaubten Energien, $V_0 \leq E < 0$, korrespondiert zum Wertebereich $0 < \eta < \sqrt{\tilde{V}_0}$. Bei $\eta = \sqrt{\tilde{V}_0}$ wird $\kappa = 0$.

Zusammen mit Gl. (4.11) wird aus den Bedingungsgleichungen (4.15a) und (4.15b)

symmetrisch:
$$\tan(\eta) \stackrel{!}{=} \frac{\kappa \frac{L}{2}}{k \frac{L}{2}} = \frac{\sqrt{\widetilde{V}_0 - \eta^2}}{\eta}$$

anti-symmetrisch: $\tan(\eta) \stackrel{!}{=} -\frac{k \frac{L}{2}}{\kappa \frac{L}{2}} = \underbrace{-\frac{\eta}{\sqrt{\widetilde{V}_0 - \eta^2}}}{\sqrt{\widetilde{V}_0 - \eta^2}}$

Die graphische Lösung dieser Gleichungen erhält man aus den Schnittpunkten der in <u>Abbildung (4.4)</u> dargestellten Kurven $\frac{\kappa}{k}$ bzw. $-\frac{k}{\kappa}$ mit der Kurve zu $\tan(\eta)$ im Bereich $0 < \eta < \sqrt{\widetilde{V}_0}$.

Symmetrische Lösungen: Wenn η von 0 bis $\sqrt{\widetilde{V}_0}$ variiert, nimmt $\frac{\kappa}{k}$ die Werte ∞ bis Null an. Daher tritt unabhängig von \widetilde{V}_0 immer ein Schnittpunkt mit $\tan \eta$ auf. Es existiert somit *immer mindestens ein symmetrischer, gebundener Zustand*. Wir können leicht die Zahl der gebundenen Zustände bei gegebenem Potentialparameter \widetilde{V}_0 bestimmen: Der Tangens hat Nullstellen bei $\eta = n\pi$. Die Zahl der Schnittpunkte von $\frac{\kappa}{k}$ mit $\tan(\eta)$ nimmt immer um Eins zu, wenn der Maximalwert von η , also $\sqrt{\widetilde{V}_0}$, die Werte $n\pi$ überschreitet. Die Zahl der symmetrischen Eigenwerte ist somit $N_+ = \operatorname{int}(\frac{\sqrt{\widetilde{V}_0}}{\pi} + 1)$.

i-

0

95

ist Eins bei I V_0 I = (hquer^2 / 2m) (2pi/L)^2



Abbildung 4.4: Graphische Bestimmung der Energie-Eigenwerte im Potentialtopf. Aufgetragen ist $\tan(\eta)$ über $\eta \in (0, \sqrt{\widetilde{V}_0})$ und außerdem die Funktionen $-\frac{k}{\kappa}$ und $\frac{\kappa}{k}$. Es wurde $\widetilde{V}_0 = 100$ gewählt.

Antisymmetrische Lösungen: Die Zahl der Schnittpunkte von $-\frac{k}{\kappa}$ mit $\tan(\eta)$ wächst um Eins, wenn $\sqrt{\widetilde{V}_0}$ die Werte $n\pi + \pi/2$ überschreitet. Die Zahl der anti-symmetrischen Eigenwerte ist demnach $N_- = \operatorname{int}(\frac{\sqrt{\widetilde{V}_0}}{\pi} + 1/2)$.

Zur <u>Festlegung der Wellenfunktion</u> Gl. (4.14) nutzen wir die <u>Stetigkeitsbe</u> dingungen Gl. (4.15a) und Gl. (4.15b)

$$A_s = B_s e^{\kappa \frac{L}{2}} \cos(k \frac{L}{2})$$
$$A_a = -B_a e^{\kappa \frac{L}{2}} \sin(k \frac{L}{2})$$

aus und erhalten daraus mit der dimensionslosen Länge $\xi = x/(\frac{L}{2})$ und $\eta = k\frac{L}{2}$:

obleme

19.4.21

1



Abbildung 4.5: Wellenfunktionen $\psi_n(\xi)$ zu allen drei gebundenen Eigenzuständen des Potentialtopfes mit einer Potentialhöhe $\tilde{V}_0 = 13$.



Die Parameter $B_{a,s}$ ergeben sich aus der Normierung. Ein Beispiel ist in der Abbildung (4.5) dargestellt. Die Wellenfunktion zur tiefsten Energie ist symmetrisch. Sie hat *keine Nullstelle*. Die Zahl der Nullstellen ist n - 1, wobei die Quantenzahl $n = 1, 2, 3 \dots$ die erlaubten Energien E_n durchnumeriert. In Abbildung (4.5) gibt die Null-Linie der Wellenfunktionen wieder gleichzeitig auf der rechten Achse die zugehörige Eigenenergie E_n an. In den verwendeten Einheiten befinden sich die Potentialwände bei ± 1 . **Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit außerhalb des Topfes nicht Null.** Man erkennt, dass stattdessen die Wellenfunktion mit steigender Quantenzahl n zunehmend aus dem Potentialbereich hinausragt.

4.4 Unabhängige Freiheitsgrade: Produktansatz

Oft hat das betrachtete physikalische System voneinander unabhängige Freiheitsgrade, zum Beispiel bei räumlich getrennten Teilsystemen, oder bei einem Potential der Form $V(\vec{x}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$ (siehe unten). Ob die Freiheitsgrade unabhängig sind, hängt von den Wechselwirkungen ab, d.h. vom jeweiligen Hamiltonoperator. Wir betrachten zwei Freiheitsgrade *A* und *B*, mit zugehörigen Basisvektoren $\{|\varphi^A\rangle\}$ und $\{|\varphi^B\rangle\}$ (Beispiel: $\{|x\rangle\}$ und $\{|y\rangle\}$, die zueinander paarweise orthonormal sein sollen. Der zugehörige Produktraum wird von den Basisvektoren $|\varphi^A, \varphi^B\rangle = |\varphi^A\rangle \otimes |\varphi^B\rangle$ aufgespannt. Die Freiheitsgrade *A* und \hat{H}^B besteht, die getrennt auf die Freiheitsgrade *A* bzw. *B* wirken:

$$\hat{H} = \hat{H}^A + \hat{H}^B, \quad \text{mit} \tag{4.17}$$

$$\hat{H}^{A} |\varphi^{A}, \varphi^{B}\rangle = \left(\hat{H}^{A} |\varphi^{A}\rangle\right) \otimes |\varphi^{B}\rangle \quad \text{und}$$
 (4.18)

$$\hat{H}^{B} |\varphi^{A}, \varphi^{B}\rangle = |\varphi^{A}\rangle \otimes \left(\hat{H}^{B} |\varphi^{B}\rangle\right) .$$
 (4.19)

Dann gilt auch

$$[\hat{H}^A, \hat{H}^B] = 0 .$$

Die Lösungen der Eigenwertgleichung für den Gesamt-Hamiltonoperator

$$\hat{H} \ket{\psi} = E \ket{\psi}$$

bekommt man nun durch den Produktansatz

$$|\psi_{n,m}\rangle = |\psi_n^A\rangle \otimes |\psi_m^B\rangle,$$
 (4.20)

wobei $|\psi_n^A\rangle$ und $|\psi_m^B\rangle$ jeweils Linearkombinationen von $\{|\varphi^A\rangle\}$ bzw. $\{|\varphi^B\rangle\}$ sind und Lösungen der Eigenwertgleichungen zu \hat{H}^A bzw. \hat{H}^B :

$$\hat{H}^A |\psi_n^A\rangle = E_n^A |\psi_n^A\rangle \tag{4.21}$$

$$\hat{H}^B |\psi_m^B\rangle = E_m^B |\psi_m^B\rangle . \tag{4.22}$$

Beweis:

$$\frac{\hat{H} |\psi_{n,m}\rangle}{\hat{H} |\psi_{n,m}\rangle} = \left(\hat{H}^{A} + \hat{H}^{B}\right) \left(|\psi_{n}^{A}\rangle \otimes |\psi_{m}^{B}\rangle\right) \\
= \left(\hat{H}^{A} |\psi_{n}^{A}\rangle\right) \otimes |\psi_{m}^{B}\rangle + |\psi_{n}^{A}\rangle \otimes \left(\hat{H}^{B} |\psi_{m}^{B}\rangle\right) \\
= E_{n}^{A} |\psi_{n,m}\rangle + E_{m}^{B} |\psi_{n,m}\rangle \\
= (E_{n}^{A} + E_{m}^{B}) |\psi_{n,m}\rangle \\
= E_{n,m} |\psi_{n,m}\rangle$$

Die Eigenenergie $E_{n,m}$ ist somit die Summe der Einzelenergien, und man schreibt sie am einfachsten mit einem doppelten Index.

Beispiel 1: Ein Teilchen in einem Potential $V(\vec{x}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$. Der Ortsraum wird von den Basisvektoren $|\vec{x}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ aufgespannt. Der Hamiltonoperator ist Beispiel: Quaderförmiger 3d Potentialtopf mit Längen (L_x, L_y, L_z), mit unendlich hohen Wänden. Dann hat V(x) die angegebene Form. Gesamt-Figenzustände kann man mit (n

 \hat{H}^x wirkt nur auf $|x\rangle$, etc. Die Eigenvektoren von \hat{H} kann man dann als Produkt

$$|\Psi\rangle = |\psi^x\rangle \otimes |\psi^y\rangle \otimes |\psi^z\rangle$$
 (4.25)

schreiben, wobei $|\Psi\rangle = |\psi^x\rangle \otimes |\psi^y\rangle \otimes |\psi^z\rangle$

$$|\psi^{\nu}\rangle = \int d\nu \ \psi^{\nu}(\nu) \ |\nu\rangle \quad (\nu = x, y, z)$$
(4.26)

Eigenvektoren von \hat{H}^{ν} sein müssen, d.h. zum Beispiel

$$\hat{H}^{y} |\psi^{y}\rangle = E^{y} |\psi^{y}\rangle.$$
(4.27)

Beispiel 2: Ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, das sich in einem <u>räumlich konstanten Magnetfeld</u> \vec{B} und einem ortsabhängigen Potential $V(\vec{x})$ bewegt. Das Teilchen hat Ortsfreiheitsgrade mit Basisvektoren $|\vec{x}\rangle$, und einen Spinfreiheitsgrad mit Basisvektoren $|\sigma\rangle = |+z\rangle$ und $|-z\rangle$. Der Produktraum wird von den Basisvektoren $|\vec{x}, \sigma\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |\sigma\rangle$ aufgespannt. Der Hamiltonoperator ist, wie schon in Kap. 3.2 erwähnt,

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\vec{Q}})}_{=:\hat{H}^{\vec{x}}} \underbrace{-\mu \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}}_{=:\hat{H}^{\sigma}}.$$
(4.28)

 $\hat{H}^{\vec{x}}$ wirkt nur auf $|\vec{x}\rangle$ und \hat{H}^{σ} wirkt nur auf $|\sigma\rangle$. Die Eigenvektoren von \hat{H} kann man deshalb als Produkt

$$|\Psi\rangle = |\psi^{\vec{x}}\rangle \otimes |\chi\rangle \tag{4.29}$$

schreiben, wobei

$$|\psi^{\vec{x}}\rangle = \int d^3x \,\psi(\vec{x}) \,|\vec{x}\rangle$$
 , $\text{und} \,|\chi\rangle = \sum_{\sigma=\pm z} \chi^{\sigma} \,|\sigma\rangle$ (4.30)

Eigenvektoren von $\hat{H}^{\vec{x}}$ bzw. \hat{H}^{σ} sein müssen, d.h.

$$\hat{H}^{\vec{x}}|\psi^{\vec{x}}
angle = E^{\vec{x}}|\psi^{\vec{x}}
angle$$
 und $\hat{H}^{\sigma}|\chi
angle = E^{\chi}|\chi
angle$.

Anderer Fall (Gegenbeispiel): Das Magnetfeld sei ortsabhängig:

Lösungsweg: Wähle z-Achse in Richtung des Magnetfelds --> aus H^sigma wird dann - mu B(x) S^z (B=Größe des Magnetfelds, S^z = Spin-Operator in z-Richtung) Löse Eigenwertgleichung <u>getrennt</u> für (1) I psi_up> und (2) I psi_down> (siehe Seite 61) (1) Für Ipsi_up > : Wegen - mu B(x) S^z I+z> = - mu B(x) (hquer/2) I+z> bekommt man ein effektives Potential V(x) - mu (hquer/2) B(x) für Ipsi_up> (2) Entsprechend mit dem anderen Vorzeichen: V(x) + mu (hquer/2) B(x) für Ipsi_down> Einen beliebigen Zustandsvektor kann man wie immer als Linearkombination der Eigenzustände von H schreiben.

20.4.2023

4.5 Anwendungen: Quantentopf, Quantendraht, Quantenpunkt

Quantentopf (Quantum well)

Ein Quantentopf ist eine Schichtstruktur, bei der in einer Richtung ("z-Richtung") die Bewegung von Teilchen wie in einem Potentialtopf stark eingeschränkt ist. Beispiel: Ein Halbleiter mit einer sehr dünnen Schicht, die eine geringere Bandlücke hat als die dickeren Schichten oberhalb und unterhalb. Wenn die Dicke der mittleren Schicht kleiner ist als etwa die de-Broglie-Wellenlänge der Elektronen, dann wird die Quantisierung der Energieniveaus in z-Richtung wichtig (in Halbleitern unterhalb von einigen Dutzend Nanometern). In der x- und y-Richtung sind die Begrenzungen der Schichten sehr viel weiter entfernt, so dass die Teilchen sich in diesen Richtungen im wesentlichen frei verhalten ($V_x = V_y = 0 \rightarrow$ ebene Wellen $|\psi_x\rangle$ und $|\psi_y\rangle$ mit kontinuierlichen Energiewerten). Bei Dotierung entsteht ein sogenanntes zweidimensionales Elektrongas (2DEG). Einen Quantentopf erhält man auch durch Aufbringen einer sehr dünnen Metallschicht auf einen Isolator.

Die wichtigste Anwendung sind Laserdioden, bei denen inzwischen für die aktive Schicht meist Quantentöpfe verwendet werden. Durch die Begrenzung von Elektronen und Löchern auf den Quantentopf erhält man eine höhere Rekombinationswahrscheinlichkeit und damit eine höhere Effizienz. Die Lichtemission findet meist in x-y-Richtung statt.



Abbildung 4.6: Aufbau einer Laserdiode mit einem nahezu zweidimensionalen Quantentopf als aktivem Bereich. (http://en.wikipedia.org/wiki/Laser_diode, 3.5.2015.)

4.5. Anwendungen: Quantentopf, Quantendraht, Quantenpunkt

Quantendraht (Quantum wire)

Dies ist eine Struktur, bei der die Bewegung in zwei Raumrichtungen auf genügend kleiner Skala eingeschränkt ist. Die Herstellung ist schwieriger als bei Quantentöpfen. Man kann zum Beispiel Halbleiter verwenden, deren Oberfläche nicht entlang einer Kristallebene verläuft und daher Stufen aufweist. Das Aufbringen von dünnen Schichten führt zu Quantendrähten entlang der Stufen. Eine andere Möglichkeit ist das geeignete Aufbringen von Metallatomen auf einer isolierenden Oberfläche. Wie Quantendrähte verhalten sich auch Kohlenstoff-Nanoröhrchen (Carbon nanotubes).

Wenn keine internen Störstellen auftreten, erfolgt der Transport von Teilchen im Quantendraht "ballistisch" (wie eine ebene Welle). Man kann zeigen, dass dann der Leitwert (Conductance) $G = \frac{1}{R} = \frac{I}{U}$ quantisiert ist (!), in ganzzahligen Vielfachen von $2\frac{e^2}{h}$, wobei der Faktor 2 vom Spin kommt. Bei einwandigen Kohlenstoffnanoröhrchen beträgt er (wegen zweier räumlicher Moden) ein Vielfaches von $4\frac{e^2}{h}$.



Abbildung 4.7: Kohlenstoffnanoröhrchen. (http://jnm.snmjournals.org/content/48/7/1039/F1.medium.gif, 3.5.2015)

Quantenpunkt (Quantum dot)

Sogenannte Quantenpunkte sind Strukturen von typischerweise einigen tausend Atomen, in denen Elektronen in allen Raumrichtungen eingeschränkt sind. Sie haben deswegen diskrete Energieniveaus, im Unterschied zu den sonst in Festkörpern auftretenden Bändern. Man spricht von "künstlichen Atomen", die man im Prinzip auch wieder zu größeren Strukturen in der Art von "Molekülen" oder Drähten zusammenfügen kann. Die Herstellung kann auf unterschiedlichste Art erfolgen, etwa (i) durch Abscheiden von Nanokristallen aus einer Lösung (sogar im Bereich von Kilogramm), (ii) lithographisch, (iii) durch Molekularstrahlepitaxie (MBE) (selbstorganisiert, bei stark verschiedenen Gitterkonstanten von Subtrat und Quantenpunktmaterial), oder (iv) dynamisch durch elektrische Felder in einem Quantentopf mit zusätzlich aufgebrachten Elektroden.

Die wichtigsten Anwendungen liegen im Bereich der Lichterzeugung, wegen der bei der Herstellung steuerbaren diskreten Energieniveaus, deren Differenz wie bei Atomen die Frequenz des emittierten Lichts ergibt. Zu den Anwendungen gehören die Einzelphotonerzeugung (!) (mit möglichen Anwendungen in der Quanteninformationsverarbeitung), Varianten von Lasern und von einzelnen LEDs. Die technisch wichtigste Anwendung ist derzeit (seit 2013) eine Hintergrundbeleuchtung mit verbessertem Farbspektrum bei LCD-Fernsehern, bei denen blaue LEDs über Fluoreszenz blaue, grüne, und rote Quantenpunkte mit genau definierten Wellenlängen zum Leuchten bringen.



Abbildung 4.8: Links: Fluoreszierende kommerziell hergestellte ZnCdSeS Quantenpunkte, ca. 10mg pro Flasche. Rechts: In Gruppen angeordnete Indiumarsenid-Quantenpunkte auf einer Galliumarsenid-Oberfläche, IFW Dresden. Ch. Deneke, et al, Applied Physics Letters 89, 263110 (2006).

(http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot (links), http://www.hzdr.de/db/Pic?pOid=37245 (rechts). 3.5.2015)