

## 4.6 Eigenschaften der Wellenfunktion

### 4.6.1 Untere Schranke für die Energien eines Potentialproblems

Die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators lautet

$$\left( \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{X}) \right) |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \quad .$$

Wir multiplizieren von links mit  $\langle \psi_E |$  und erhalten unter der Annahme, dass die Eigenvektoren auf Eins normiert sind

$$E = \frac{1}{2m} \langle \psi_E | \vec{P}^2 | \psi_E \rangle + \langle \psi_E | V(\vec{X}) | \psi_E \rangle \quad .$$

Die Operatoren  $\hat{P}_\alpha$  sind hermitesch und haben als solche reelle Eigenwerte. Demzufolge sind die Eigenwerte von  $\vec{P}^2$  größer oder gleich Null. Das liefert die Ungleichung

$$\begin{aligned} E &\geq \langle \psi_E | V(\vec{X}) | \psi_E \rangle = \int \psi_E^*(\vec{x}) V(\vec{x}) \psi_E(\vec{x}) d^D x \\ &\geq V_{\min} \underbrace{\int \psi_E^*(\vec{x}) \psi_E(\vec{x}) d^D x}_{=1} = V_{\min} \quad . \end{aligned}$$

Hierbei ist  $V_{\min}$  der Minimalwert des Potentials. Die Gleichheit kann nur vorliegen, wenn  $\langle \psi_E | \hat{P}_\alpha^2 | \psi_E \rangle = 0$  für  $\alpha = 1, 2, 3$ , d.h. wenn die untere Schranke aller drei Erwartungswerte angenommen wird. Das ist nur der Fall, wenn  $|\psi_E\rangle$  Eigenvektor aller  $\hat{P}_\alpha^2$  zum Eigenwert Null ist. Diese Eigenfunktion hat die allgemeine Gestalt

$$\psi_{E=0}(\vec{x}) = a_0 + \sum_{\alpha=1}^3 b_\alpha x_\alpha + \sum_{\substack{\alpha \neq \beta \\ \alpha, \beta=1}} c_{\alpha\beta} x_\alpha x_\beta$$

und ist nicht normierbar. Wir haben somit das Ergebnis

FÜR DIE ENERGIE-EIGENWERTE NORMIERBARER ZUSTÄNDE GILT

$$E > \min_{\vec{x}} V(\vec{x}) \quad . \quad (4.31)$$

## 4.6.2 Paritätsoperator. Parität der Wellenfunktionen bei symmetrischen Potentialen

Wir wollen hier untersuchen, welche allgemeinen Eigenschaften man ableiten kann, wenn das Potential symmetrisch ist, d.h. wenn  $V(-\vec{x}) = V(\vec{x})$ .

Wir betrachten zunächst den Paritäts-Operator  $\hat{S}$  (oft auch  $\mathcal{P}$  genannt), der im Argument einer Funktion eine Spiegelung am Koordinaten-Ursprung bewirkt

$$\hat{S} \psi(\vec{x}) := \psi(-\vec{x}) \Leftrightarrow \langle \vec{x} | \hat{S} | \psi \rangle = \langle -x | \psi \rangle \Leftrightarrow \langle \vec{x} | \hat{S} = \langle -\vec{x} | \quad (4.32)$$

Aus  $\langle \vec{x} | \hat{S} | \vec{y} \rangle = \langle -\vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta(\vec{x} + \vec{y}) = \langle \vec{x} | -\vec{y} \rangle$  folgt, dass auch  $\hat{S} | \vec{y} \rangle = | -\vec{y} \rangle$  gilt. Aus einer analogen Rechnung folgt, dass  $\hat{S}$  hermitesch ist.

Wenn das Potential symmetrisch ist, d.h.  $V(\vec{x}) = V(-\vec{x})$ , dann vertauscht  $\hat{S}$  mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$  (s. Übungen). Daraus folgt, dass  $\hat{H}$  und  $\hat{S}$  einen gemeinsamen, vollständigen Satz von Eigenvektoren besitzen.

Einige Eigenschaften der *Eigenzustände von  $\hat{S}$*  lassen sich leicht bestimmen. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{S} | \psi_m \rangle = m | \psi_m \rangle \quad (4.33) \quad \checkmark$$

Aus  $\hat{S}^2 = \hat{1}$  folgt  $m^2 = 1$ , d.h., die Eigenwerte des Paritäts-Operators  $\hat{S}$  sind  $m = \pm 1$ . Das bedeutet mit

$$\psi_m(-\vec{x}) = \langle x | \hat{S} | \psi_s \rangle = \pm \psi_m(\vec{x}) \quad (4.34)$$

aber auch, dass die Eigenvektoren von  $\hat{S}$  in der Ortsraumdarstellung symmetrische bzw. anti-symmetrische Funktionen sind. Man spricht von Wellenfunktionen gerader bzw. ungerader Parität. Da es ein gemeinsames System von Eigenvektoren von  $\hat{S}$  und  $\hat{H}$  gibt, gilt:

Bei einem symmetrischen Potential kann man die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  so wählen, dass sie gerade bzw. ungerade Parität besitzen.

Wenn Eigenwerte von  $\hat{H}$  entartet sind, können die Wellenfunktionen unterschiedlicher Parität gemischt werden. Bei nicht-entarteten Eigenwerten

## 4.6. Eigenschaften der Wellenfunktion

erhält man jedoch zwingend Eigenfunktionen fester Parität. Das gilt insbesondere für gebundene Zustände in eindimensionalen Potentialproblemen (s.u.).

20.4.2023

### 4.6.3 Gebundene Zustände in 1d sind nicht entartet

Wir zeigen, dass eindimensionale Potentialprobleme keine „entarteten“ gebundenen Eigenzustände besitzen, das sind mehrere linear unabhängige gebundene Zustände zur selben Energie. Dazu gehen wir vom Gegenteil aus und nehmen an, es gäbe zwei entartete Eigenvektoren  $\psi_1$  und  $\psi_2$  zum selben Eigenwert  $E$ , d.h.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) + V(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x) \quad (4.35a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x) \quad (4.35b)$$

Multiplizieren wir Gleichung (4.35a) von links mit  $\psi_2$  und Gleichung (4.35b) mit  $\psi_1$  und subtrahieren diese Gleichungen voneinander so erhalten wir

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2(x)\psi_1''(x) - \psi_1(x)\psi_2''(x)) & = 0 \\ \Rightarrow & \frac{d}{dx}(\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x)) & = 0 \\ \Rightarrow & \psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x) & = c \end{aligned}$$

Die Konstante  $c$  ist unabhängig von  $x$  und lässt sich insbesondere aus dem Verhalten für  $x \rightarrow \infty$  bestimmen. Im Falle gebundener Zustände verschwinden die Wellenfunktionen und ihre Ableitungen im Unendlichen. Daraus folgt

$$c = \lim_{x \rightarrow \infty} (\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x)) = 0$$

---

und somit (zunächst mit der Einschränkung  $\psi_{1,2}(x) \neq 0$ )

$$\begin{aligned}\psi_2(x)\psi_1'(x) &= \psi_1(x)\psi_2'(x) \\ \frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} &= \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} \\ \frac{d}{dx} \ln \psi_1(x) &= \frac{d}{dx} \ln \psi_2(x)\end{aligned}$$

Die Differentialgleichung kann unmittelbar integriert werden

$$\begin{aligned}\ln \psi_1(x) &= \ln \psi_2(x) + d \\ \underline{\psi_1(x)} &= \psi_2(x) \cdot e^d \propto \underline{\psi_2(x)}\end{aligned}$$

Das heißt, dass die beiden Zustände sich nur durch einen Phasenfaktor unterscheiden und physikalisch identisch sind.<sup>1</sup> Dies beweist die eingangs aufgestellte Behauptung.

#### 4.6.4 Zahl der Nullstellen gebundener Zustände in 1d

Wir haben beim Potentialtopf gesehen, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  im Grundzustand keine Nullstelle hat, und dass mit jedem höheren Energieniveau eine zusätzliche Nullstelle in der Wellenfunktion auftaucht. Dies gilt allgemein für gebundene Zustände in 1d und ist die Aussage des Knotensatzes.

Eine analoge Eigenschaft gilt auch für die radiale Wellenfunktion des Wasserstoffatoms, allerdings in Abhängigkeit von einer radialen Quantenzahl  $N_r$ , aber nicht für die Hauptquantenzahl  $n$ , mit  $E_n \sim 1/n^2$ .

---

<sup>1</sup>Bei der Division durch  $\psi_1$  oder  $\psi_2$  muss man Bereiche (Punkte oder Intervalle der x-Achse) ausschliessen, in denen  $\psi_1 = 0$  oder  $\psi_2 = 0$ . Wir haben zunächst nur  $\psi_1 \propto \psi_2$  ausserhalb dieser Bereiche gezeigt. Wenn aber innerhalb eines solchen Bereiches etwa  $\psi_1 = 0$  und  $\psi_2 \neq 0$  gelten würde, so wären  $\psi_1$  oder/und  $\psi_2$  oder ihre Ableitungen am Rande dieses Bereichs unstetig, was nicht möglich ist.

## 4.6. Eigenschaften der Wellenfunktion

### 4.6.5 Existenz reellwertiger Eigenfunktionen in 1d

In einem System beliebiger Dimension ohne Magnetfeld ist der Hamiltonoperator  $\frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{Q})$  reell; insbesondere gilt  $V^*(\vec{x}) = V(\vec{x})$ .

(Mit Magnetfeld enthält der Hamiltonoperator  $[\vec{P} - e\vec{A}(\vec{Q})]^2$  (Gl. (3.11)) und wegen  $\vec{P} \rightarrow -i\hbar\nabla$  würde ein komplexer Anteil auftauchen.)

Die komplex konjugierte Schrödingergleichung lautet dann

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x)^* + V(x)\psi(x)^* = E\psi(x)^* .$$

mit reellem Potential  $V(\vec{x})$ . Ohne Magnetfeld erfüllt daher  $\psi^*(x)$  unabhängig von der Dimension des Problems dieselbe Schrödingergleichung wie  $\psi(x)$  zur selben Energie.

Damit ist auch jede Linearkombination von  $\psi$  und  $\psi^*$  Lösung des Eigenwertproblems zur selben Energie. Wir können speziell die reellwertigen Kombinationen

$$\begin{aligned}\psi_r(x) &= \frac{\psi(x) + \psi^*(x)}{2} \\ \psi_i(x) &= \frac{\psi(x) - \psi^*(x)}{2i}\end{aligned}$$

wählen.

Bei eindimensionalen Problemen gilt für die gebundenen Zustände zusätzlich, da sie nicht entartet sein können, dass beide Lösungen identisch sind. Wir haben somit gezeigt:

Die Wellenfunktionen der gebundenen Eigenzustände eines eindimensionalen Potentialproblems ohne Magnetfeld können immer reell gewählt werden.

Wie in Abschnitt 4.6.6 gezeigt wird, verschwindet in diesem Fall auch der Strom.

## 4.6.6 Wahrscheinlichkeits-Strom und Kontinuitätsgleichung

Wir betrachten (nun wieder in drei Dimensionen) ein Teilchen in einem zeitunabhängigen äußeren Potential ohne Magnetfeld. Dann ist der Hamiltonoperator reell (Kap. 4.6.5).

(mit Magnetfeld s.u.)

$$-\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \quad (4.36a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi^*(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \quad (4.36b)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(\vec{x}, t)$ , das quantenmechanische Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  anzutreffen, ist bekanntlich gegeben durch

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (4.37)$$

Wir berechnen nun die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Aus Gl. (4.36a) und Gl. (4.36b) erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \left( \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \right) \cdot \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi^*(\vec{x}, t) \right] \cdot \psi(\vec{x}, t) \right. \\ &\quad \left. - \psi^*(\vec{x}, t) \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) \right] \right\} \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} \left\{ \underbrace{\psi(\vec{x}, t) \Delta \psi^*(\vec{x}, t)}_z - \underbrace{\psi^*(\vec{x}, t) \Delta \psi(\vec{x}, t)}_{z^*} \right\} \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} (-2i) \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \Delta \psi(\vec{x}, t) \right) \\ &= -\frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \Delta \psi(\vec{x}, t) \right) . \end{aligned}$$

## 4.6. Eigenschaften der Wellenfunktion

Die rechte Seite kann mit der Identität

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \operatorname{Im} \left[ \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right] &= \operatorname{Im} \left[ \vec{\nabla} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right) \right] \\ &= \operatorname{Im} \left[ \underbrace{(\vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t))^* (\vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t))}_{\in \mathbb{R}} + \psi^*(\vec{x}, t) \underbrace{\vec{\nabla} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t)}_{\Delta} \right] \\ &= \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \Delta \psi(\vec{x}, t) \right) \end{aligned}$$

weiter vereinfacht werden, und wir erhalten schließlich die Kontinuitätsgleichung mit der sogenannten Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\vec{j}(\vec{x}, t)$

<u>KONTINUITÄTSGLEICHUNG</u>	
$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t)$	(4.38a)
$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right)$	(4.38b)

Man kann auch  $\vec{j} = \operatorname{Re} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\vec{p}}{m} \psi(\vec{x}, t) \right)$  schreiben (wobei mit „ $\vec{p} \psi(x)$ “ wieder  $\langle x | \vec{p} | \psi \rangle = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(x)$  gemeint ist) und sieht dann, dass in  $\vec{j}$  so etwas wie eine Geschwindigkeit  $v = \frac{p}{m}$  auftaucht.

Es ist interessant, die Wellenfunktion nach Betrag und Phase zu trennen:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{i\varphi(\vec{x}, t)} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) &= \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{-i\varphi(\vec{x}, t)} \left( \vec{\nabla} \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} \right) e^{i\varphi(\vec{x}, t)} \\ &\quad + \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{-i\varphi(\vec{x}, t)} \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{i\varphi(\vec{x}, t)} i \vec{\nabla} \varphi(\vec{x}, t) \\ &= \underbrace{\sqrt{\rho(\vec{x}, t)} \left( \vec{\nabla} \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} \right)}_{\in \mathbb{R}} + \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} i \vec{\nabla} \varphi(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right) &= \rho(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \varphi(\vec{x}, t) \\ \Rightarrow \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{m} \rho(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \varphi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.40)$$

Der Strom wird von der Phase "getragen". Wenn die Wellenfunktion reell ist, dann ist die Phase  $\varphi$  Null, und damit auch der Strom. Dann verschwindet auch die Divergenz des Stromes und mit der Kontinuitätsgleichung ebenfalls die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\varphi = 0 \Rightarrow \vec{j}(\vec{x}) = 0 \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = 0.$$

Reelle Wellenfunktionen liefern keinen Strom.  
Bei reellen Wellenfunktionen ist  $\rho(\vec{x}, t)$  zeitunabhängig.

### Strom mit elektromagnetischem Feld

Es soll noch erwähnt werden, wie die Kontinuitätsgleichung aussieht, wenn ein elektromagnetisches Feld anliegt. In diesem Fall gehen das Potential und der Impuls gemäß Gl. (3.11) über in

$$V(\vec{x}) \longrightarrow V(\vec{x}) + q \underbrace{\Phi(\vec{x})}_{\text{skalares Potential} \rightarrow \text{elektrisches Feld}}$$

$$\vec{P} \longrightarrow \vec{P} - q \underbrace{\vec{A}(\vec{x})}_{\text{Vektorpotential} \rightarrow \text{magnetisches Feld } \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}}$$

In der kinetischen Energie taucht durch  $(\vec{P} - q\vec{A})^2$  eine Kopplung  $\vec{P}\vec{A}$  zwischen Magnetfeld und Impuls des Teilchens auf. Die Kontinuitätsgleichung bleibt weiter gültig, es ändert sich lediglich die Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right) - \frac{q}{m} \vec{A} \rho(\vec{x}, t) \quad (4.41)$$

Zusätzlich zu dem Term, den wir bereits abgeleitet haben, trägt noch das Vektorpotential zur Stromdichte bei.

## 4.7 Freie Teilchen

Wir betrachten jetzt nicht-gebundene Teilchen. Wenn das Potential  $V = V_0$  konstant ist, d.h. unabhängig vom Ort, sind die Teilchen *frei* (der sogenannte „freie Fall“). Wir betrachten der Einfachheit halber 1 Dimension. In drei Dimensionen muss man  $x$  und  $k$  durch  $\vec{x}$  und  $\vec{k}$  ersetzen. Der Hamiltonoperator ist im freien Fall  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0$ .

### 4.7.1 Ebene Wellen

Die Eigenzustände des Hamiltonoperators für ein konstantes Potential haben wir schon in Abschnitt 4.2 kennengelernt. Wenn es keine Ortsabhängigkeit im Potential gibt, machen Lösungen mit  $E < V_0$ , die zu  $x = -\infty$  oder  $x = \infty$  hin exponentiell divergieren, keinen Sinn. Freie Teilchen werden durch die oszillierenden Lösungen der stationären Schrödingergleichung  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$  beschrieben, mit einer beliebigen Energie  $E > V_0$ : E-V\_0

$$\psi(x, t = 0) = \psi(x) = \underline{a e^{ikx} + b e^{-ikx}} \quad (4.42)$$

$$\text{und } \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V_0 .$$

Ein solcher Zustand ist nicht normierbar

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \infty .$$

Er beschreibt nicht ein einzelnes Teilchen, sondern, wie wir gleich sehen werden, rechts- und linkslaufende Ströme von unabhängigen Teilchen fester Energie  $E$ , in der Art von ebenen Wellen.

Die Zeitabhängigkeit des Eigenzustandes Gl. (4.42) ist durch den Zeitentwicklungsoperator  $\exp(-\frac{i}{\hbar} Ht)$  gegeben:

$$\psi(x, t) = \underline{e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(x)} .$$

Dies ist eine Schwingung der Form  $e^{-i\omega t}$  mit

$$\underline{E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0} . \quad (4.43)$$

Für die Wellenfunktion Gl. (4.42) lautet die Zeitentwicklung

$$\psi(x, t) = a e^{i(kx - \omega t)} + b e^{-i(kx + \omega t)}. \quad (4.44)$$

Diese Wellenfunktion ist auch periodisch im Ort, mit der Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/k$ . Dies ist die de Broglie Wellenlänge, Gl. (1.1).

### Ort konstanter Phase

Wir untersuchen, wie sich bei den ebenen Wellen Gl. (4.44) der Ort  $\tilde{x}$  fester Phase zeitlich verändert. Wir betrachten zunächst den Term  $e^{i(kx - \omega t)}$ :

$$kx - \omega t = \text{const} \quad \Rightarrow \quad x = \frac{\omega}{k}t + \frac{\text{const}}{k} = v_{\text{Phase}} t + x_0$$

Diese Gleichung definiert die Phasengeschwindigkeit eine typische Geschwindigkeit des Problems:

$$v_{\text{Phase}} := \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \approx \frac{\hbar}{2m} \quad (4.45)$$

Der Term  $e^{i(kx - \omega t)}$ , mit dieser positiven Phasengeschwindigkeit, beschreibt eine rechts-laufende Welle, da für konstante Phase bei zunehmender Zeit  $t$  auch der Ort  $x$  zunimmt. Dazu korrespondierend ist die Funktion  $e^{i(kx - \omega t)}$  eine Eigenfunktion der Impulsoperators mit Eigenwert  $p = \hbar k$ .

Entsprechend beschreibt der Term  $e^{-i(kx + \omega t)}$  eine links-laufende Welle mit Impuls  $-\hbar k$ .

### Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Zunächst bestimmen wir den Beitrag, der von der rechtslaufenden Welle geliefert wird

$$\psi_r = a e^{ikx} e^{-i\omega t}$$

$|a|^2 \int (e^{ikx} e^{-i\omega t} \cdot ik e^{-i\omega t} e^{ikx})$

$$\begin{aligned} \underline{j_r} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi^* \frac{d}{dx} \psi \right) = \frac{\hbar}{m} |a|^2 \text{Im} \left( \psi^* ik \underbrace{e^{-i\omega t} e^{ikx}}_{\psi} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m} |a|^2 \cdot k = |a|^2 \frac{\hbar k}{m} = |a|^2 \frac{p}{m} \end{aligned}$$



## 4.7. Freie Teilchen

Analog liefert die linkslaufende Welle die Stromdichte  $j_l = |b|^2 \frac{-p}{m}$ .

### 4.7.2 Wellenpakete

Die Eigenzustände (4.42) sind räumlich ausgedehnt und nicht normierbar. Aus ihnen können aber durch geeignete Linearkombination von Lösungen zu verschiedenen Energien,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk ,$$

d.h. durch passende Wahl der Fourierkoeffizienten  $\tilde{\psi}(k)$ , lokalisierte Zustände konstruiert werden, sogenannte Wellenpakete. Ein wichtiges Beispiel sind Gaußsche Wellenpakete (s.u.). Ein solcher Zustand beschreibt nach wie vor ein Ensemble von einzelnen propagierenden Teilchen. Er ist jedoch kein Eigenzustand des Hamiltonoperators mehr. Die Form des Wellenpakets ändert sich daher im Allgemeinen mit der Zeit!<sup>2</sup>

Die Zeitentwicklung des Zustands mit  $\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$  ergibt bei freien Teilchen

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk , \quad (4.46)$$

mit einer  $k$ -abhängigen Frequenz

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 .$$

Wir nehmen nun an, dass die Amplitude  $\tilde{\psi}(k)$  ein Maximum bei einer Wellenzahl  $k_0$  hat. Wir entwickeln  $\omega(k)$  um  $k_0$ :<sup>3</sup>

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \frac{d\omega(k_0)}{dk} + \dots$$

Wenn wir aus  $\psi(x, t)$  einen globalen Phasenfaktor herausziehen (~~der keinen Einfluss auf physikalische Messergebnisse hat~~), erhalten wir

$$\psi(x, t) = e^{i(k_0 x - \omega(k_0) t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{i((k - k_0)x - (k - k_0) \frac{d\omega(k_0)}{dk} t)} dk + \dots$$

<sup>2</sup>Wichtige Ausnahme im nicht-freien Fall: „kohärente Zustände“ beim harmonischen Oszillator (Kap. 4.9.6).

<sup>3</sup>Die weggelassenen höheren Ordnungen werden bei nicht-konstantem Potential  $V(x)$  wichtig.

**Korrektur:**  
Der Phasenfaktor hängt hier von  $x$  und  $t$  ab und ist deswegen physikalisch relevant. Beispiel: Erwartungswert des Impulsoperators  $p$  -> räuml. Ableitung von  $\psi$

(4.47)

Der Exponent im Integral ist  $(k - k_0)(x - \frac{d\omega}{dk}t)$ . Das Maximum des Wellenpakets bewegt sich daher mit der

Gruppengeschwindigkeit  $v_g := \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$ .

Weil die Gruppengeschwindigkeit nicht mit der Phasengeschwindigkeit der einzelnen ebenen Wellen übereinstimmt, ändert sich mit der Zeit die Form des Wellenpakets. In Gl. (3.59) wurde gezeigt, dass die Unschärfe im freien Fall für beliebige Anfangs-Wellenfunktionen sogar mindestens linear mit der Zeit anwächst,

(Folgt aus dem Ehrenfest-Theorem: Wird später besprochen)

$$\Delta Q(t) \Delta Q(0) \geq \frac{\hbar}{2m} t.$$

Beispiel: Ein Gaußsches Wellenpaket (s.a. Übungen) ist durch

$$\psi(x) = (\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right).$$

gegeben. Es hat die minimal mögliche Unschärfe

$$(\Delta x) (\Delta p) = \frac{\hbar}{2},$$

die jedoch bei Zeitentwicklung mit dem freien Hamiltonoperator  $\frac{p^2}{2m} + V_0$  wie  $\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m\sigma_0^2}\right)^2}$  zunimmt.

Im Skript 2019 noch nicht ausgebessert

## 4.8 Streuung an einer Potentialbarriere

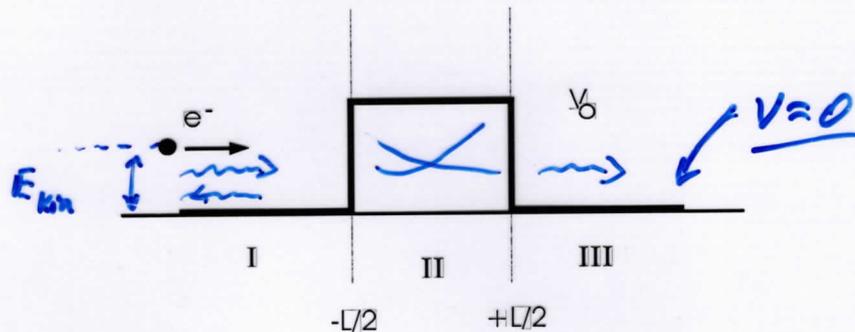


Abbildung 4.9: Streuung an der Potential-Barriere.

Wir untersuchen nun quantenmechanisch die Streuung von Teilchen an einem Potential. Gebundene Zustände haben wir bereits im letzten Abschnitt behandelt; wir konzentrieren uns hier auf ungebundene Zustände. Wir betrachten sowohl den Fall einer Potential-Barriere, so wie er in Abbildung (4.9) dargestellt ist ( $V_0 > 0$ ), als auch den Fall einer Potential-Mulde ( $V_0 < 0$ ). In beiden Fällen interessieren uns aber ungebundene Zustände, d.h. Energien  $E > 0$ .

Von links treffen Teilchen auf das Potential. Wir werden die Intensität  $R$  der rückgestreuten und die Intensität  $T$  der transmittierten Teilchen berechnen.  $R$  und  $T$  bezeichnet man auch als Reflexionskoeffizienten bzw. Transmissionskoeffizienten. Sie sind definiert als

$$R = \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{ein}}} = \frac{\text{Zahl der reflektierten Teilchen}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen}}$$

$$T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{ein}}} = \frac{\text{Zahl der transmittierten Teilchen}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen}}$$

$$R + T = 1 \quad \checkmark$$

### 4.8.1 Allgemeine Lösung

#### Klassische Behandlung

Für die klassische Behandlung ist es sinnvoll, das Potential abzurunden (siehe Abbildung (4.10)), damit keine  $\delta$ -förmige Kräfte auftreten. Zu Beginn, d.h. weit vor der Potential-Barriere, ist die kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$

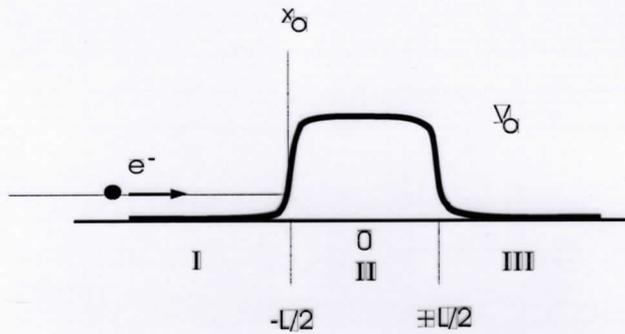


Abbildung 4.10: *Klassische Behandlung der Potentialbarriere.*

gleich der Gesamtenergie  $E$ . Im Bereich des Potentials gilt  $E_{\text{kin}} = E - V(x)$ . Das Teilchen wird je nach Vorzeichen des Potentials von ihm abgebremst oder beschleunigt. Es müssen klassisch zwei Fälle unterschieden werden:

1. Wenn die Gesamtenergie größer ist als die Potential-Barriere, wird das Teilchen nicht reflektiert und fliegt über die Potential-Barriere hinweg. Dies gilt insbesondere für eine Potential-Mulde ( $V_0 < 0$ ).

2. Ist die Potential-Barriere hingegen größer als die Gesamtenergie, so werden alle Teilchen an der Barriere reflektiert. Zur Ruhe kommen sie dabei an einem Umkehrpunkt  $x_0$ , an dem  $E_{\text{kin}} = 0$ , d.h. wenn  $V(x_0) = E$ . Klassisch gilt daher:

$$1. V_0 > E \quad \Rightarrow \quad R = 1, T = 0$$

$$2. V_0 < E \quad \Rightarrow \quad R = 0, T = 1$$

In diese Überlegungen geht die tatsächliche Form des Potentials nicht ein. Für die Quantenmechanik ist es leichter, mit dem rechteckigen Potential aus Abbildung (4.2) zu rechnen.

### Quantenmechanische Behandlung

In den Bereichen I und III ist die allgemeine Lösung

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

mit der Wellenzahl  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  und  $E > 0$ . (4.48)

#### 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

Diese Wellenfunktion ist, wie wir schon gesehen haben, nicht normierbar, und beschreibt einen Strom von nach rechts einlaufenden und einen Strom von nach links reflektierten Teilchen, mit der Wellenzahl  $k$ .

Einzelne Teilchen dagegen entsprechen Wellenpaketen, also Linearkombinationen von Lösungen zu verschiedenen Wellenzahlen. Um die Rechnung einfacher zu halten, betrachten wir im Folgenden die Impulseigenzustände Gl. (4.48).

Hinter der Barriere (Bereich III) kann es, wegen der vorgegebenen Situation mit von links einlaufenden Teilchen, nur nach rechts auslaufende Teilchen (Wellen) geben. Daher muss dort  $A_2 = 0$  sein.

Im Bereich II gilt

$$\psi(x) = B_1 \cdot e^{\kappa x} + B_2 \cdot e^{-\kappa x}$$

mit  $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \begin{cases} |\kappa| & E \leq V_0 \\ i|\kappa| & E > V_0 \end{cases}, \quad (4.49)$

d.h. die Wellenfunktion ist im Bereich II wellenartig, wenn  $E > V_0$ , und exponentiell wenn  $E < V_0$ .

Die gesamte Wellenfunktion lautet somit

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} & ; x \leq -\frac{L}{2} \\ B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} & ; -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ C e^{ikx} & ; x \geq \frac{L}{2} \end{cases}.$$

Die Stetigkeitsbedingungen von  $\psi(x)$  und  $\psi'(x)$  liefern 4 Randbedingungen zur Festlegung der 5 Unbekannten. Zusätzlich müssen wir noch festlegen, wieviele Teilchen pro Zeiteinheit einfallen. Die Konstante  $A_1$  hängt direkt mit der Stromdichte Gl. (4.46) der einfallenden Teilchen zusammen

$$j_e = \frac{\hbar}{m} |A_1|^2 \cdot k$$

Uns interessieren der Reflektions- und der Transmissionskoeffizient

$$R = \left| \frac{j_r}{j_e} \right| = \frac{k |A_2|^2}{k |A_1|^2} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \quad j_e; j_r \dots \text{einfallende; reflektierte Stromdichte}$$

$$T = \left| \frac{j_t}{j_e} \right| = \frac{k |C|^2}{k |A_1|^2} = \frac{|C|^2}{|A_1|^2}$$

27.4.2023

Der Strom der einfallenden Teilchen wird experimentell vorgegeben. Wir können ihn jedoch beliebig wählen, z.B.  $A_1 = 1$ , da in  $R$  und  $T$  nur die Verhältnisse eingehen.

Bei  $A_1$  ist auch die physikalische Einheit weggelassen. Sie spielt in den Verhältnissen  $R$  und  $T$  keine Rolle. Einheit: Das Integral über  $|\psi(x)|^2 dx$  muss 1 sein, daher ist die Einheit von  $\psi(x)$  in 1 räuml. Dim. von der Dimension  $1/\sqrt{\text{Meter}}$

Es bleibt als Lösung

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A e^{-ikx} & ; x \leq -\frac{L}{2} \\ B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} & ; -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ C e^{ikx} & ; x \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.50)$$

Die restlichen Konstanten kann man nun über die Randbedingungen bestimmen. Die Rechnung dazu ist relativ aufwendig. Sie wird im Folgenden der Vollständigkeit halber wiedergegeben. Das Ergebnis steht in Gl. (4.53) und (4.54).

$$\psi(-\frac{L}{2}) : e^{ik(-\frac{L}{2})} + A \cdot e^{-ik(-\frac{L}{2})} = B_1 \cdot e^{\kappa(-\frac{L}{2})} + B_2 \cdot e^{-\kappa(-\frac{L}{2})}$$

$$\psi(\frac{L}{2}) : C \cdot e^{ik(\frac{L}{2})} = B_1 \cdot e^{\kappa(\frac{L}{2})} + B_2 \cdot e^{-\kappa(\frac{L}{2})}$$

$$\psi'(-\frac{L}{2}) : e^{-ik\frac{L}{2}} - A e^{ik\frac{L}{2}} = -i\rho(B_1 e^{-\kappa\frac{L}{2}} - B_2 e^{\kappa\frac{L}{2}})$$

$$\psi'(\frac{L}{2}) : C e^{ik\frac{L}{2}} = -i\rho(B_1 e^{\kappa\frac{L}{2}} - B_2 e^{-\kappa\frac{L}{2}})$$

mit  $\rho := \frac{\kappa}{k}$ . In Matrixschreibweise und mit der Abkürzung  $q = e^{\kappa L}$  folgt

$$i) \quad \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} + e^{ik\frac{L}{2}} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} q^{-\frac{1}{2}} & q^{\frac{1}{2}} \\ q^{\frac{1}{2}} & q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}}_{=: \mathcal{M}} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$$

$$ii) \quad \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} - e^{ik\frac{L}{2}} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = i\rho \underbrace{\begin{pmatrix} -q^{-\frac{1}{2}} & q^{\frac{1}{2}} \\ q^{\frac{1}{2}} & -q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}}_{=: \mathcal{N}} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$$

## 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

Das Inverse der Matrix  $\mathcal{M}$  lautet

$$\mathcal{M}^{-1} = \frac{1}{(q - q^{-1})} \begin{pmatrix} -q^{-\frac{1}{2}} & q^{\frac{1}{2}} \\ q^{\frac{1}{2}} & -q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{(q - q^{-1})} \mathcal{N}$$

Wir multiplizieren *i)* von links mit  $\mathcal{M}^{-1} \Rightarrow$

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathcal{M}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} + e^{ik\frac{L}{2}} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} \quad (4.51)$$

und setzen das Ergebnis in *ii)* ein. Mit Abkürzungen  $\text{sh} := \sinh(\kappa L)$  und  $\text{ch} := \cosh(\kappa L)$  führt das zu

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} - e^{ik\frac{L}{2}} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} &= i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} + e^{ik\frac{L}{2}} i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} \\ e^{ik\frac{L}{2}} \left( \hat{\mathbb{1}} + i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right) \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} &= \left( \hat{\mathbb{1}} - i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right) \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wir erhalten somit für die Koeffizienten  $A$  und  $C$  das Zwischenergebnis

$$\begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = e^{-ikL} \underbrace{\left( \hat{\mathbb{1}} + i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right)^{-1} \left( \hat{\mathbb{1}} - i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right)}_K \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

Nun gilt es, die Matrix  $K$  zu berechnen. Dazu benötigen wir zunächst

$$\mathcal{N} \cdot \mathcal{M}^{-1} = \frac{1}{q - q^{-1}} \mathcal{N}^2 = \frac{1}{q - q^{-1}} \begin{pmatrix} q + q^{-1} & -2 \\ -2 & q + q^{-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\text{sh}} \begin{pmatrix} \text{ch} & -1 \\ -1 & \text{ch} \end{pmatrix}$$

Daraus erhalten wir

$$\begin{aligned} \left( \hat{\mathbb{1}} - i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} & + \frac{i\rho}{\text{sh}} \\ + \frac{i\rho}{\text{sh}} & 1 - \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} \end{pmatrix} \\ \left( \hat{\mathbb{1}} + i\rho \mathcal{N} \mathcal{M}^{-1} \right)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} & - \frac{i\rho}{\text{sh}} \\ - \frac{i\rho}{\text{sh}} & 1 + \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{\det} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} & \frac{i\rho}{\text{sh}} \\ \frac{i\rho}{\text{sh}} & 1 + \frac{i\rho \text{ch}}{\text{sh}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit der Determinanten der Matrix  $(\hat{\mathbf{I}} + i\rho\mathcal{N}\mathcal{M}^{-1})$

$$\det = \left(1 + \frac{i\rho\text{ch}}{\text{sh}}\right)^2 + \frac{\rho^2}{\text{sh}^2} = 1 + 2\frac{i\rho\text{ch}}{\text{sh}} - \rho^2\frac{\text{ch}^2 - 1}{\text{sh}^2} = 1 - \rho^2 + 2\frac{i\rho\text{ch}}{\text{sh}}$$

berechnet sich die Matrix  $K$  zu

$$K = \frac{\text{sh}}{(1 - \rho^2) + 2\frac{i\rho\text{ch}}{\text{sh}}} \begin{pmatrix} (1 + \rho^2) & 2\frac{i\rho}{\text{sh}} \\ 2\frac{i\rho}{\text{sh}} & (1 + \rho^2) \end{pmatrix} .$$

Mit Gl. (4.52) und Gl. (4.51) lauten die Koeffizienten

$$\begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = \frac{e^{-ikL}}{(1 - \rho^2)\text{sh} + 2i\rho\text{ch}} \begin{pmatrix} (1 + \rho^2)\text{sh} \\ 2i\rho \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{e^{-ikL/2}}{(1 - \rho^2)\text{sh} + 2i\rho\text{ch}} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} (1 - \rho^2)\text{sh} + 2i\rho\text{ch} + (1 + \rho^2)\text{sh} \\ 2i\rho \end{pmatrix}$$

$$= \frac{2e^{-ikL/2}}{(1 - \rho^2)\text{sh} + 2i\rho\text{ch}} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} \text{sh} + i\rho\text{ch} \\ i\rho \end{pmatrix} .$$

Das Ergebnis für die gesuchten Konstanten der Wellenfunktion lautet

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{Z} e^{-ikL} (1 + \rho^2) \sinh(\kappa L) \\ C &= \frac{1}{Z} i 2\rho e^{-ikL} \\ B_1 &= -\frac{1}{Z} e^{-ikL/2} (1 - i\rho) e^{-\kappa L/2} \\ B_2 &= \frac{1}{Z} e^{-ikL/2} (1 + i\rho) e^{+\kappa L/2} \end{aligned} \quad (4.53)$$

$$Z = (1 - \rho^2) \sinh(\kappa L) + 2i\rho \cosh(\kappa L) \quad \text{mit } \rho = \frac{\kappa}{k} .$$

Daraus erhält man

#### 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

##### REFLEXIONS- UND TRANSMISSIONSKOEFFIZIENT

$$\underline{R} = |A|^2 = \frac{(1 + \rho^2)^2 \cdot \sinh^2(\kappa L)}{(1 + \rho^2)^2 \sinh^2(\kappa L) + 4\rho^2} \quad (4.54)$$

$$\underline{T} = |C|^2 = \frac{4\rho^2}{(1 + \rho^2)^2 \sinh^2(\kappa L) + 4\rho^2} = 1 - R, \quad \text{mit } \rho = \frac{\kappa}{k}.$$

Die wegen der Stromerhaltung  $j_e = j_t + j_r$  notwendige Summenregel  $R + T = 1$  ist automatisch erfüllt. Die Ergebnisse hängen von den dimensionslosen Größen  $\rho = \kappa/k$  und  $\kappa L$  ab, die aus den ursprünglich 3 Parametern  $L, V_0$  und  $E$  des Problems gebildet sind. Man kann sie auch als

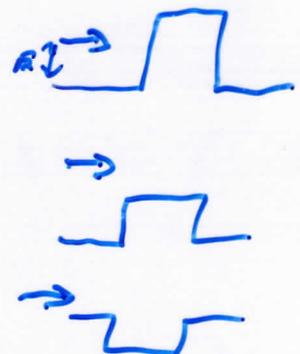
$$\kappa L = 2\pi \frac{L}{\tilde{\lambda}} \quad \text{mit } \tilde{\lambda} := \frac{2\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (4.55)$$

und  $\rho \equiv \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}$

schreiben. Man sieht, dass in  $\kappa L$  die Länge  $\tilde{\lambda}$  auftaucht, die von der Differenz  $(V_0 - E)$  abhängt, während  $\rho$  eine Funktion des Verhältnisses  $E/V_0$  ist.

Wir werden die beiden Fälle

1. hohe Potential-Barriere ( $V_0 > E > 0$ )
2. niedrige Potential-Barriere mit  $E > V_0 > 0$   
oder Potential-Mulde  $E > 0 > V_0$ ,



die sich auch klassisch unterscheiden, im Folgenden separat diskutieren.

## 4.8.2 Hohe Potential-Barriere ( $V_0 > E > 0$ ), Raster-Tunnel-Mikroskop

Wir betrachten zunächst den Fall, dass die Energie des Teilchens klassisch nicht ausreicht, die Barriere zu überwinden. Die Situation ist in Abb.(4.11) skizziert. Hier ist  $V_0 > E > 0$  und daher  $k \in \mathbb{R}$  und  $\kappa \in \mathbb{R}$ . Die Well-

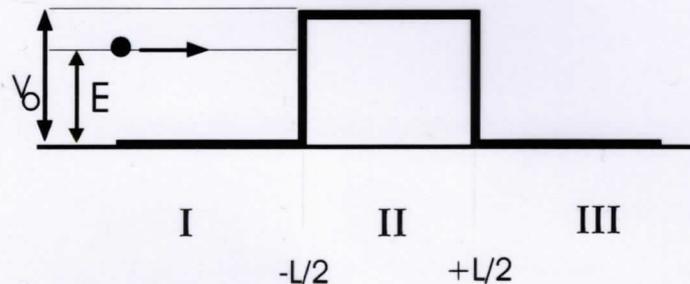


Abbildung 4.11: Energie geringer als Potential-Barriere.

lenfunktion zeigt somit oszillierendes Verhalten außerhalb des Barrieren-Bereichs und einen exponentiellen Abfall<sup>4</sup> im Barrieren-Bereich. Wie die obige Rechnung gezeigt hat, gibt es quantenmechanisch – im Widerspruch zur klassischen Erwartung – dennoch eine nicht-verschwindende Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen die Potentialbarriere überwindet. Man spricht vom Tunneleffekt. In den Gleichungen (4.54) und (4.55) sind alle Größen reell.

Wir betrachten den Spezialfall einer sehr breiten und/oder hohen Barriere

$$\underline{1 \ll \kappa \cdot L} = \frac{2\pi\hbar \cancel{L}}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \cdot \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot L$$

In diesem Fall kann  $\sinh(\kappa L)$  in Gl. (4.54) vereinfacht werden

$$\sinh^2(\kappa L) = \frac{e^{2\kappa L} + e^{-2\kappa L} - 2}{4} \cong \frac{e^{2\kappa L}}{4} \gg 1$$

$$\Rightarrow \underline{T} \cong \frac{4\rho^2}{(1 + \rho^2)^2} \underline{4e^{-2\kappa L}}$$

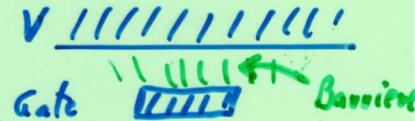
<sup>4</sup>Der exponentiell ansteigende Beitrag verschwindet nicht, wird aber vom abfallenden Teil dominiert.

#### 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

Der Transmissionskoeffizient *verschwindet demnach exponentiell* mit der *Barrierenbreite* und der *Barrierenhöhe*. Er wird aber nur für unendlich breite oder unendlich hohe Potentialbarrieren zu Null.

Eine inzwischen alltägliche Anwendung des Tunneleffektes findet sich in Flash-Speichern. Dort wird ein Transistor (MOSFET) mit einem „Floating Gate“ benutzt, welches ganz von einer Isolatorschicht umgeben ist. Durch Anlegen einer geeigneten Spannung werden die Potentiale so eingestellt, dass Elektronen auf das Floating Gate tunneln, wo sie ohne äußere Spannung lange Zeit bleiben.

Eine weitere Anwendung des Tunneleffektes ist das



#### Raster-Tunnel-Mikroskop

(Nobelpreis 1986 H.Rohrer, G.Binnig (IBM-Rüschlikon))

Beim Scanning Tunneling Mikroskop (STM) wird eine Metallspitze über eine Probenoberfläche mittels „Piezoantrieb“ geführt, siehe Abbildung (4.12). Die leitende (oder leitend gemachte) Probe wird zeilenweise abgetastet. Zwischen der Spitze und der Probe wird ein Potential angelegt, wodurch ein „Tunnel-Strom“ fließt, der vom Abstand der Spitze zur lokalen Probenoberfläche abhängt. Mit Hilfe einer Piezo-Mechanik kann die Spitze auch senkrecht zur Probenoberfläche bewegt werden. Es gibt verschiedene Arten, das Tunnel-Mikroskop zu betreiben. In einer Betriebsart wird die Spitze immer so nachjustiert, dass der Tunnel-Strom konstant ist. Die hierfür notwendige Verschiebung ist ein Maß für die Höhe der Probenoberfläche (genauer: für die Zustandsdichte der Elektronen).

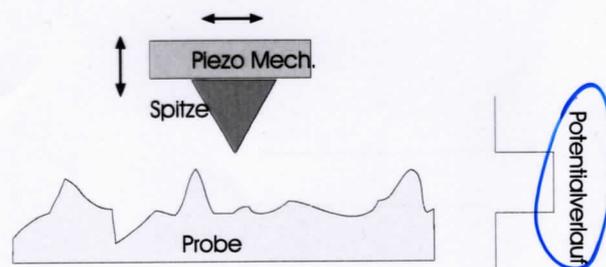


Abbildung 4.12: Raster-Tunnel-Mikroskop.

Ein STM hat atomare Auflösung. Das erscheint zunächst unglaublich, da die Spitze makroskopische Dimensionen hat. Der Grund ist, dass wegen der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnel-Stromes vom Abstand das „unterste Atom“ der Spitze den dominanten Beitrag zum Strom liefert (siehe Abbildung (4.13)).

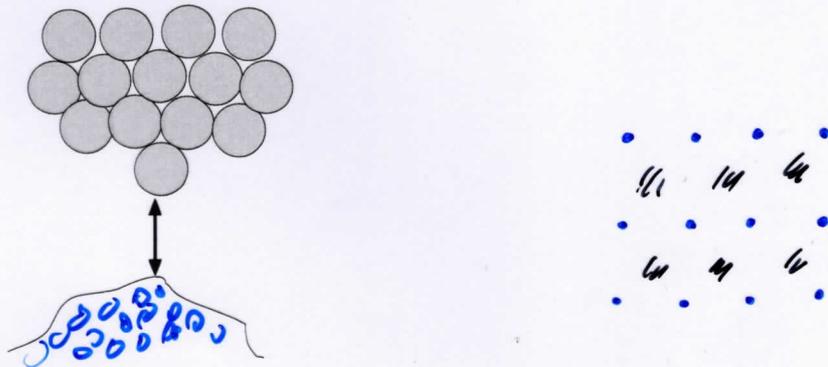


Abbildung 4.13: Spitze des Raster-Tunnel-Mikroskops.

26.4.2021

### 4.8.3 Niedrige Potential-Barriere ( $E > V_0 > 0$ ) oder Potential-Mulde ( $E > 0 > V_0$ )

Wir betrachten nun die Fälle, in denen das Teilchen klassisch nicht an der Barriere reflektiert würde ( $R = 0; T = 1$ ), also den in Abbildung (4.14) dargestellten Fall einer niedrigen Potential-Barriere, und den Fall einer Potential-Mulde. Quantenmechanisch wird die uns hier interessierende

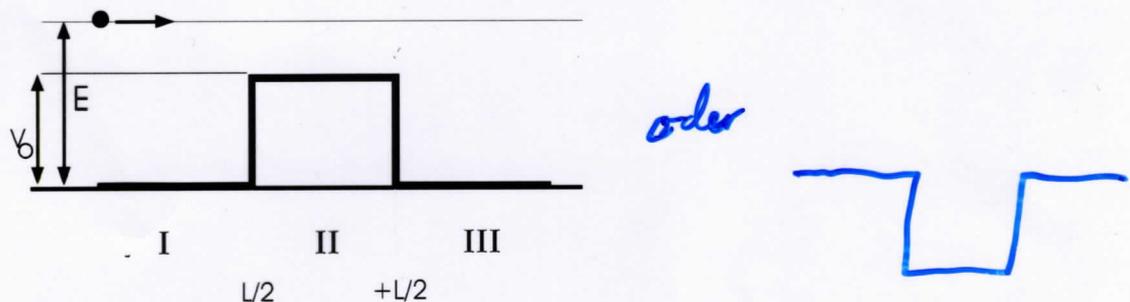


Abbildung 4.14: Energie größer als Potential-Barriere.

Situation ebenfalls durch die Gleichungen (4.54) und (4.55) beschrieben.

#### 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

Wegen  $E > V_0$  sind nun  $\kappa$ ,  $\rho$  und  $\tilde{\lambda}$  imaginär, und man drückt die Gleichungen besser über  $|\kappa|$  und  $|\rho|$  aus. Aus Gl. (4.54) und Gl. (4.55) wird wegen  $\sinh^2(i|\kappa|) = -\sin^2|\kappa|$  :

REFLEXIONS- UND TRANSMISSIONSKOEFFIZIENT ( $E > \max\{0, V_0\}$ )

$$T = \frac{4|\rho|^2}{(1 - |\rho|^2)^2 \sin^2(|\kappa|L) + 4|\rho|^2} \quad (4.56)$$

$$R = 1 - T$$

$$\text{mit } |\kappa| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}, \quad \text{und } |\rho| = \frac{|\kappa|}{k} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}. \quad (4.57)$$

Im Barrierenbereich ist die Lösung nun auch oszillierend:

$$\psi_{II} = B_1 e^{i|\kappa|x} + B_2 e^{-i|\kappa|x}$$

$$|\kappa|L = 2\pi L / \lambda$$

mit der de-Broglie Wellenlänge  $|\tilde{\lambda}| = 2\pi/|\kappa|$ . Quantenmechanisch kann auch der klassische Wert  $T = 1$  (bzw.  $R = 0$ ) erreicht werden. Das ist immer dann der Fall, wenn  $\sin|\kappa|L = 0$ , bzw.  $|\kappa|L = n\pi$ . Anschaulich bedeutet das, dass die Barrierenbreite ein halbzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\tilde{\lambda}$  ist und die Welle in die Potentialbarriere „hineinpasst“. Wenn man die Ausbreitung eines Wellenpaketes untersucht, so findet man, dass das Teilchen in diesen Fällen besonders lange im Potentialbereich anzutreffen ist. Dieses Phänomen nennt man Streuresonanz. Es ist auch als Ramsauer-Effekt bekannt, nach dem 1921 von Ramsauer beobachteten Effekt, dass Elektronen bestimmter Energien in Edelgasen nicht absorbiert werden. In Abbildung (4.15) ist der Transmissionskoeffizient einmal als Funktion der reduzierten Energie  $\epsilon$  und einmal als Funktion einer reduzierten Länge  $\lambda$  aufgetragen. Im letzteren Bild erkennt man das Resonanzphänomen.

Da obige Überlegungen auch für  $V_0 < 0$  gelten, besagt die quantenmechanische Rechnung, dass es auch an niedrigen Potentialtöpfen und Potentialmulden Reflektionen gibt. Dies wäre klassisch keinesfalls möglich.

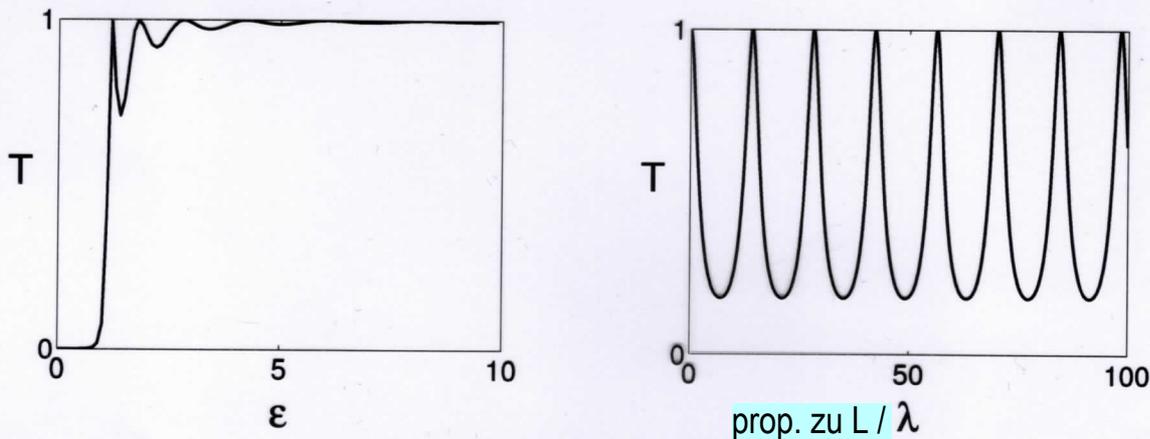


Abbildung 4.15: Transmissionskoeffizient als Funktion von  $\epsilon := E/V_0$   
 für  $\lambda := L/\frac{\hbar}{\sqrt{2m|V_0|}} = 7$  (links) und als Funktion von  $\lambda$  für  $\epsilon = 1.05$  (rechts).

N.B.: Zur Oszillation in der linken Abbildung: kappa hängt von  $E-V_0$  ab:  
 $E-V_0 = V_0$  (epsilon - 1)

#### 4.8.4 Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(x)|^2$  eines quantenmechanischen Teilchens errechnet sich aus den Gleichungen (4.50), unterschiedlich für die Gebiete I, II, und III.

- Im Gebiet I entstehen durch Reflexionen an der Potential-Barriere auch Wellen, die nach links laufen. Daraus resultiert eine Interferenz, die, wie in Abbildung (4.16) dargestellt, zu einer oszillierenden Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte führt.

$$|\psi(x)|^2 = 1 + |A|^2 + 2 \underbrace{\text{Re}(A^* e^{2ikx})}_{|A| \cos(2kx - \varphi)}$$

$$A = |A| \cdot e^{i\varphi}$$

$$R = |A|^2$$

$$|\psi(x)|^2 = 1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx - \varphi)$$

(=> räumlicher Mittelwert ist 1+R)

#### 4.8. Streuung an einer Potentialbarriere

- II) Im Gebiet II kommt es darauf an, ob  $E < V_0$  oder  $E > V_0$ , d.h. ob  $\kappa$  reell oder imaginär ist. Wenn  $\kappa$  reell ist, so findet man ein exponentielles Abklingen. Wenn  $\kappa$  aber imaginär ist, so beobachtet man auch im Bereich der Potentialbarriere oszillierendes Verhalten.

$$|\psi(x)|^2 = |B_1|^2 e^{2\kappa x} + |B_2|^2 e^{-2\kappa x} + 2\text{Re}(B_1^* B_2)$$

- III) Im Gebiet III läuft die Welle nur nach rechts, es kann daher keine Interferenz geben. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist dort überall konstant.

$$\psi(x) = C e^{ikx} \Rightarrow |\psi(x)|^2 = |C|^2 = T = 1 - R.$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten sind in Abbildung (4.16) für die drei diskutierten Fälle aufgetragen.

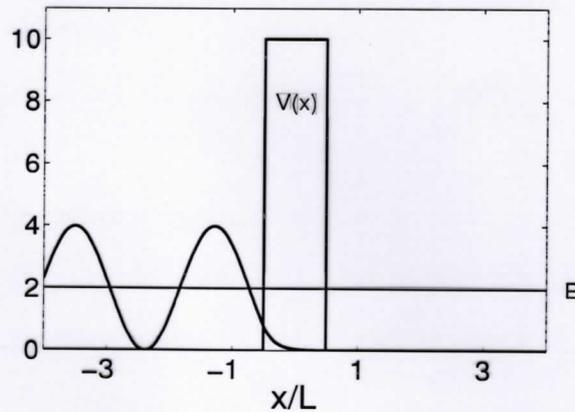
Wir haben hier nur den eher unrealistischen Fall behandelt, dass die einlaufenden Teilchen in einem Impulseigenzustand präpariert werden und räumlich völlig unbestimmt sind. Der interessantere Fall ist sicherlich der, dass die einfallenden Teilchen als Wellenpaket präpariert werden. Die mathematische Behandlung ist dann wesentlich komplizierter, liefert aber dieselben Reflexions- und Transmissionskoeffizienten. Die Rechnung dazu findet man z.B. im Buch von Shankar.

Die vertikale Skala gilt sowohl für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte als auch (in willkürlichen Einheiten) für Energie und Potential

(für Eigenfunktionen  $\psi(x)$ )

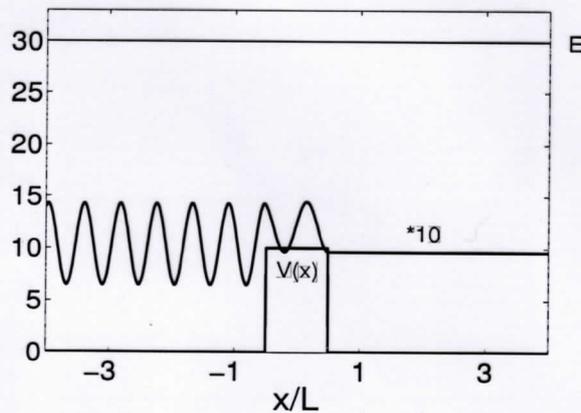


$|\Psi(x)|^2$



Oberes Bild:  
Der Transmissionskoeffizient ist hier wegen der hohen Barriere sehr klein (aber nicht Null).  
Daher ist der Reflektionskoeffizient R fast 1 und das räumliche Mittel der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im linken Bereich fast 2 (= Summe von einlaufender und reflektierter Welle; einlaufende Welle wurde auf 1 normiert, s.S. 119).

10 ·  $|\Psi(x)|^2$



Mittleres Bild:  
Hier ist der Transmissionskoeffizient fast 1, daher R fast Null, und daher das räumliche Mittel der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im linken Bereich knapp oberhalb von 1.

$|\Psi(x)|^2$

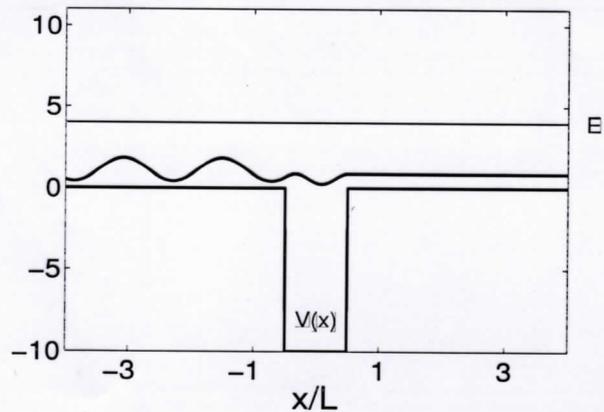


Abbildung 4.16: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten  $|\psi(x)|^2$  ( nicht aber die Wellenfunktion  $\psi(x)$ ) beim Streuproblem für die drei diskutierten Fälle  $V_0 > E > 0$ ,  $E > V_0 > 0$  und  $E > 0 > V_0$ .

