

3 Eindimensionale Systeme

Wir betrachten zunächst als einfache Beispiele von exakt lösbaren quantenmechanischen Modellen Systeme mit einem Freiheitsgrad. Diese einfachen Modelle können bereits wesentliche Aspekte von wirklichen physikalischen Systemen illustrieren.

3.1 Freie Teilchen

Das einfachste Beispiel ist ein freies Teilchen, also ein Teilchen, das keinen äußeren Kräften unterliegt. Im klassischen Fall würde es sich somit mit konstanter Geschwindigkeit fortbewegen.

3.1.1 Hamiltonoperator

Wir arbeiten in der Ortsdarstellung und verwenden deshalb die folgende Darstellung von Orts- und Impulsoperator:

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \quad \hat{p}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\Psi.$$

Der Kommutator ist somit

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \\ &= x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x \\ &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} + 1 \right) = i\hbar 1. \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator für ein freies Teilchen enthält lediglich den Term für die kinetische Energie

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2,$$

wobei wir die Ruheenergie des Teilchens nicht berücksichtigt haben. Wir können dies zunächst so motivieren, dass wir den Nullpunkt der Energieachse

auf die Ruheenergie setzen. Diese Näherung ist exakt im Grenzfall nichtrelativistischer Bewegung.

Mit diesem Hamiltonoperator wird die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial^2 x} = \mathcal{E}\Psi(x).$$

Dies ist eine lineare, homogene Differenzialgleichung zweiter Ordnung

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial^2 x} + \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} \Psi(x) = 0,$$

die wir als Wellengleichung mehrfach angetroffen haben. Sie wird als Poisson-Gleichung bezeichnet.

3.1.2 Eigenzustände

Wir lösen die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit Hilfe des Ansatzes

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.1)$$

d.h. eine Superposition von nach links und rechts laufenden Wellen. Einsetzen in die zeitunabhängige Schrödingergleichung ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial^2 x} \left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \right) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x) = \mathcal{E}\Psi(x). \end{aligned}$$

Wir können somit die Energie

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

mit der kinetischen Energie identifizieren und den Impuls mit

$$p = \hbar k,$$

also durch den Wellenvektor, multipliziert mit der Planck'schen Konstanten. Somit sind die von de Broglie vorgeschlagenen Wellen wirklich Lösungen der Schrödingergleichung für ein freies Teilchen.

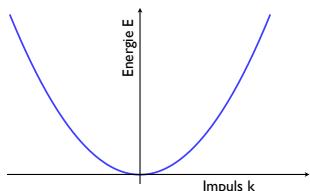


Abbildung 3.1: Dispersionsrelation für freie Teilchen.

Da wir hier ebene Wellen als Lösungen ansetzen, sind sie nicht normierbar. In wirklichen physikalischen Situationen muss eine normierbare Funktion über die Rand-, resp. Anfangsbedingungen erzwungen werden. Ebene Wellen stellen jedoch eine nützliche Grundlage für spätere Diskussionen dar und können als Basisfunktionen verwendet werden.

3.1.3 Zeitabhängige Schrödingergleichung

Wir setzen nun die Lösung des zeitunabhängigen Problems in die zeitabhängige Schrödingergleichung ein:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi(x)$$

und erhalten die Lösung

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-i\omega t}$$

mit

$$\omega = \frac{\mathcal{E}}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

wiederum in Übereinstimmung mit de Broglie's Annahme.

Die Darstellung der Kreisfrequenz ω als Funktion des Wellenvektors k wird als Dispersionsrelation bezeichnet (siehe Abb. 3.1). Wir erhalten in diesem Fall offenbar eine Parabel. Dies ist charakteristisch

für alle Arten von massiven freien Teilchen und wird insbesondere in der Festkörperphysik wieder eine wichtige Rolle spielen. Im Gegensatz dazu hatten wir bei masselosen Photonen eine lineare Dispersion gefunden.

Wir setzen den Ausdruck (3.1) für $\Psi(x)$ ein und erhalten die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + B e^{i(-kx-\omega t)},$$

also eine Überlagerung von zwei ebenen Wellen, von denen die eine nach links, die andere nach rechts läuft.

3.1.4 Normierung und Erwartungswerte

$\Psi(x,t)$ stellt zwar die allgemeine Lösung des Problems des freien Teilchens dar. Da in der vorliegenden Problemstellung keine Randbedingungen vorliegen, ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an einer bestimmten Stelle zu finden, von $-\infty$ bis $+\infty$ konstant. Aus diesem Grund ist diese Form der Lösung zum einen unrealistisch, zum anderen ist sie nicht normierbar. Realistische Lösungen erhält man, wenn man anstelle einer ebenen Welle ein Wellenpaket

$$\Psi(x) = \int A(k) e^{ikx} dk$$

ansetzt. Dadurch erhält der Impuls und damit die Energie eine gewisse Unschärfe, doch kann diese beliebig klein gehalten werden, wenn die Breite des Wellenpaketes im k -Raum klein bleibt. Ein solches Wellenpaket ist nicht nur physikalisch realistischer, es ist auch mathematisch angenehmer, da es normierbar ist.

Wir können Erwartungswerte in vielen Fällen auch berechnen wenn die Funktionen nicht normierbar sind. Dies ist besonders dann möglich, wenn es sich um Eigenfunktionen des Operators handelt. Ein gutes Beispiel dafür ist der Impulsoperator und die ebenen Wellen e^{ikx} . Wir können in diesen Fällen die Erwartungswerte nach der allgemeineren Formel

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\Psi^*(x) A \Psi(x)}{\Psi^*(x) \Psi(x)}$$

berechnen, d.h. wir dividieren durch die (unendliche) Norm der Wellenfunktion. Mit

$$A = p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

und

$$\Psi(x) = e^{ikx}$$

erhalten wir

$$\langle p \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} (-i\hbar)(ik) e^{ikx}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} e^{ikx}} = \hbar k,$$

also gerade den von de Broglie postulierten Wert. Es ist somit möglich, Erwartungswerte von nicht normierbaren Funktionen zu bestimmen, sofern es sich um Eigenfunktionen des Operators handelt.

3.1.5 Ursprung der Energieachse

Wir hatten die Energieskala so verschoben, dass die Ruheenergie des Teilchens den Nullpunkt definierte. Ein anderer Nullpunkt würde die Frequenz ω verschieben. Wir betrachten als Beispiel die Möglichkeit, dass wir die Ruheenergie mc^2 in den Hamiltonoperator mit einfügen. Allgemein gilt für eine Funktion Ψ , welche eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung bildet, dass sie als Funktion der Zeit die Form

$$\Psi(t) = \Psi(0) e^{-i\mathcal{E}t/\hbar}$$

hat, wobei \mathcal{E} die Energie des Zustandes darstellt. Eine Verschiebung der Energieachse um einen Betrag $\Delta\mathcal{E}$ ändert den Phasenfaktor somit um einen zusätzlichen Faktor $e^{-i\Delta\mathcal{E}t/\hbar}$.

Für die hier relevanten ebenen Wellen bedeutet dies, dass die neuen Lösungen die Form

$$\begin{aligned} \Psi'(x,t) &= \left(A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)} \right) \\ &\quad \cdot e^{imc^2/\hbar} \\ &= \Psi(x,t) e^{imc^2/\hbar} \end{aligned}$$

haben, wobei ω immer noch für den alten Ausdruck $\hbar k^2/2m$ steht. Dies bewirkt eine andere Phase der Wellenfunktion zu jeder Zeit außer bei $t = 0$. Die Phase ist selber aber keine beobachtbare Größe.

Wir betrachten nun den Einfluss des zusätzlichen Phasenfaktors auf einen Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\Psi'} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi'^*(x,t) A \Psi'(x,t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x,t) e^{-imc^2/\hbar} \\ &\quad \cdot A \Psi(x,t) e^{imc^2/\hbar} \\ &= \langle A \rangle_{\Psi}, \end{aligned}$$

wobei wir der Einfachheit halber angenommen haben, Ψ sei normiert. Erwartungswerte werden somit durch die Verschiebung der Energieskala nicht verändert, wir sind bei der Wahl des Ursprungs frei. Damit ist die Vernachlässigung der Ruhemasse nachträglich legitimiert.

3.2 Potenzialtopf

3.2.1 Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden

Wir betrachten nun nicht mehr freie Teilchen, sondern nehmen an, dass das Teilchen durch äußere Kräfte beeinflusst werden. Da diese Kräfte durch andere Teilchen erzeugt und i.a. durch elektromagnetische Felder, d.h. Photonen, übertragen werden, müsste man korrekterweise eine quantenmechanische Theorie aufstellen, welche diese Teilchen und Photonen enthält. Dies ist aber i.a. nicht möglich, und in vielen Fällen genügt dieser halbklassische Ansatz.

Als erstes Beispiel für ein gebundenes Teilchen betrachten wir nun ein Potenzial der Form

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

Dies ist ein wichtiges, wenn auch idealisiertes System, das eine gute Näherung für viele reale Systeme

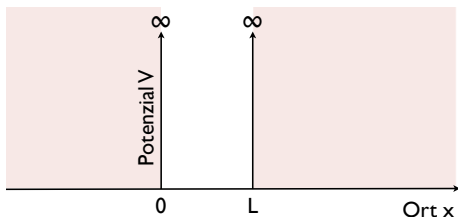


Abbildung 3.2: Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden.

darstellt. So werden in der Halbleiterphysik häufig Elektronen in sogenannte Potenzialtöpfe gebracht, u.a. um damit Halbleiterlaser herzustellen. Auf ähnliche Weise wird Licht in Glasfasern geführt, u.a. bei der Datenübertragung. Wie wir noch sehen werden, ist dies auch ein nützliches Bild für die Bindung von gewissen Elementarteilchen in Atomkernen.

Der Hamiltonoperator für dieses System enthält wie beim freien Teilchen kinetische Energie, sowie zusätzlich den Beitrag $U(x)$ der potenziellen Energie

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Da das Potenzial außerhalb der Mulde unendlich groß ist, würde eine Komponente der Wellenfunktion in diesem Bereich zu einer unendlich hohen Energie führen. Wir interessieren uns aber nur für Zustände mit endlicher Energie, so dass wir fordern müssen, dass die Zustandsfunktion außerhalb der Mulde verschwindet.

Damit können wir unsere Betrachtungen auf den Bereich der Potenzialmulde $0 < x < L$ beschränken und die Gegenwart des Potentials über die Randbedingungen berücksichtigen:

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0,$$

d.h. die Amplitude der Wellenfunktion muss am Rand des Potenzialtopfs verschwinden. Das Teilchen ist somit gebunden, es muss sich mit Wahrscheinlichkeit 1 innerhalb des Potenzialtopfs aufhalten. Dies wird auch durch die Normierungsbedingung

$$\int_0^L dx |\Psi(x)|^2 = 1$$

berücksichtigt.

3.2.2 Lösung

Wir können innerhalb des Potenzialtopfs wieder die Lösungen verwenden, die wir für freie Teilchen hergeleitet hatten, wobei durch die Randbedingungen nicht mehr alle Lösungen erlaubt sind. Anstelle der komplexen Schreibweise ist es einfacher, die Zustände als sinus-Funktionen zu schreiben, d.h. als stehende Wellen

$$\Psi_n(x,t) = C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_n t}.$$

Im Gegensatz zum freien Teilchen ist diese Zustandsfunktion kompakt und normierbar.

Die Energie, resp. Frequenz ist wie beim freien Teilchen gleich der kinetischen Energie

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Der Wellenvektor k ist hier gleich

$$k = \frac{n\pi}{L},$$

so dass

$$\omega_n = \frac{\mathcal{E}_n}{\hbar}$$

und

$$\mathcal{E}_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}.$$

Die Energie steigt somit quadratisch mit dem Index n . Die Zustandsfunktionen weisen mit zunehmender Energie eine größer werdende Zahl von Nulldurchgängen, sogenannten Knoten auf. Die schnellere Variation ist ein direktes Bild des zunehmenden Impulses und damit der zunehmenden kinetischen Energie. Interessant ist auch, dass damit die Zustandsfunktion des Teilchens in Bereiche aufgeteilt wird, zwischen denen die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu finden, verschwindet. Solche Zustände, in denen das Elektron sich nicht mehr frei bewegen kann, sondern auf einen lokalen Bereich beschränkt ist, werden als lokalisierte Zustände bezeichnet.

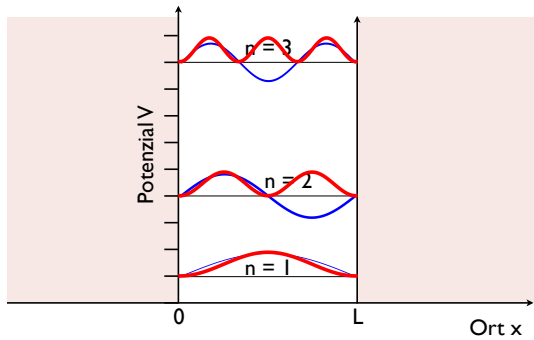


Abbildung 3.3: Energien, Zustände und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Potenzialtopf.

3.2.3 Anwendung: Halbleiter-Quantenstrukturen

Obwohl das Teilchen im Potenzialtopf zunächst nur ein mathematisch angenehmes Modellsystem ist, kann man solche Systeme heute in guter Näherung verwirklichen. Zu den wichtigsten Beispielen gehören Elektronen in Halbleiter-Schichtstrukturen.

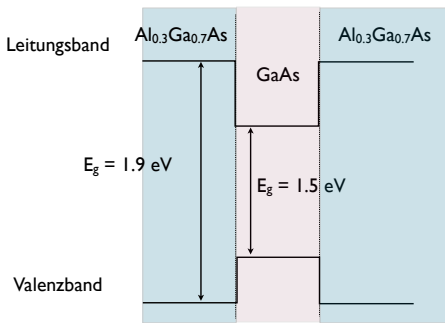


Abbildung 3.4: Quantentopf in einer AlGaAs / GaAs Halbleiter Heterostruktur.

Indem man die Zusammensetzung auf atomarer Skala kontrolliert, kann man ein effektives Potenzial für die Elektronen erzeugen, welches sie z.B. in einen sog. "Quantentopf" einschließt. Solche Strukturen sind inzwischen bei der Herstellung von Lasern sehr wichtig geworden. Natürlich stimmt unser Modell nicht exakt, aber es stellt eine erste Näherung dar.

Für ein Elektron in einem "Quantentopf" der Länge

$L = 10 \text{ nm}$ erwarten wir Energien von

$$\mathcal{E}_n = \frac{n^2 10 (10^{-34} \text{ Js})^2}{2 \cdot 10^{-30} \text{ kg } 10^{-16} \text{ m}^2} = n^2 5 \cdot 10^{-22} \text{ J},$$

oder, in eV,

$$\mathcal{E}_n = n^2 \frac{5 \cdot 10^{-22} \text{ J}}{1.6 \cdot 10^{-19}} \text{ eV} \approx n^2 3 \text{ meV}.$$

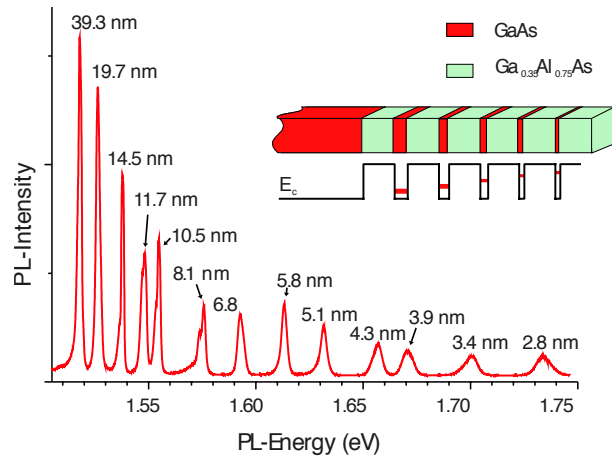


Abbildung 3.5: Multi-Quantenfilm Struktur aus GaAs/AlGaAs mit dem zugehörigen Fotolumineszenz-Spektrum.

Allerdings muss für eine exakte Beschreibung das Modell noch etwas verfeinert werden. So werden Sie in der Festkörperphysik lernen, dass die effektive Masse eines Elektrons in GaAs nur etwa 1/10 der Masse eines freien Elektrons beträgt. Da die Masse im Nenner erscheint, wird die Energie etwa 10 mal größer.

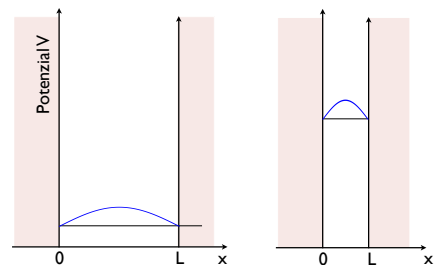


Abbildung 3.6: Energie als Funktion der Topfbreite L .

Wenn wir Quantentöpfe mit unterschiedlicher Dicke vergleichen, so erwarten wir, dass die Energie der Elektronen etwa proportional zu $1/L^2$ ansteigt. Dies wird wiederum durch die experimentellen Daten in etwa bestätigt. In der Industrie wird dieser Effekt benutzt, um die Wellenlänge der Halbleiterlaser anzupassen.

wobei für die Energie hier gelten muss

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0$$

oder

$$k = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} - U_0)}}{\hbar}.$$

3.3 Potenzialstufe

3.3.1 Schrödingergleichung

Als nächstes betrachten wir ein Potenzial, das auf der gesamten Achse endlich ist, aber am Ursprung einen Sprung aufweist:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ U_0 & \text{für } x > 0 \end{cases}.$$

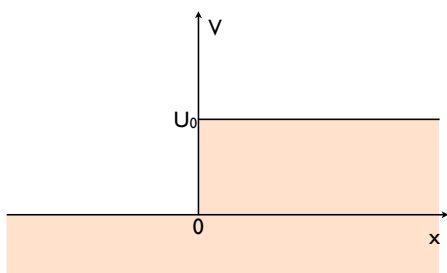


Abbildung 3.7: Potenzialstufe.

Offensichtlich können wir für den linken Halbraum die allgemeine Lösung für das freie Teilchen verwenden. Wir müssen aber zusätzlich die Randbedingung bei $x = 0$ berücksichtigen.

Für den rechten Halbraum erhalten wir eine leicht modifizierte Schrödingergleichung:

$$\mathcal{H}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U_0 \Psi(x) = \mathcal{E} \Psi(x).$$

Offenbar können wir auch dafür die allgemeine Lösung für freie Teilchen verwenden,

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

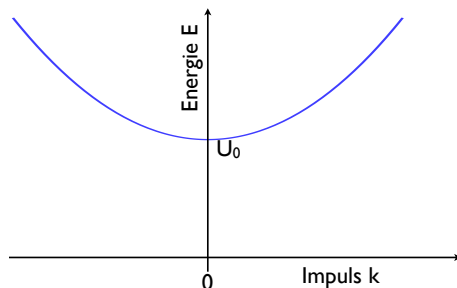


Abbildung 3.8: Dispersion.

Die Dispersionsrelation bleibt, abgesehen von der Verschiebung der Energieachse, gleich.

3.3.2 Gesamtlösung

Wir müssen jetzt eine Lösung für den gesamten Raum finden, also für positive und negative x -Werte. Die Wellenfunktion selber, sowie ihre erste Ableitung müssen überall stetig sein, insbesondere also auch bei $x = 0$. Außerdem soll die resultierende Funktion eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators sein. Dies ist nur möglich, wenn die Energie \mathcal{E}_1 links der Barriere gleich der Energie \mathcal{E}_2 rechts der Barriere ist,

$$\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}.$$

Somit muss gelten:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} - U_0)}}{\hbar},$$

wobei sich k_1 auf den linken Halbraum bezieht, k_2 auf den rechten.

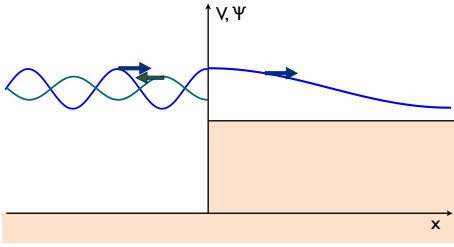


Abbildung 3.9: Zustand an der Stufe.

Somit weist die Wellenfunktion in den beiden Halbräumen unterschiedliche Wellenlängen, resp. Wellenvektoren auf, wobei die Wellenlänge umso größer wird, je höher das Potenzial ist. Gleichzeitig muss die Funktion $\Psi(x)$, wie auch ihre erste Ableitung am Ursprung stetig sein:

$$\begin{aligned}\Psi_{links}(0) &= \Psi_{rechts}(0) \\ \Psi'_{links}(0) &= \Psi'_{rechts}(0).\end{aligned}$$

Offenbar sind diese beiden Bedingungen mit einer Funktion, die nur aus zwei ebenen Wellen unterschiedlicher Wellenlänge besteht, nicht erfüllbar.

Um die Randbedingungen zu erfüllen, müssen wir drei Teilwellen betrachten: eine soll von links auf die Stufe einfallen, eine zweite von der Stufe nach links laufen, also durch Reflexion an der Stufe entstehen, und die dritte von der Stufe nach rechts laufen:

$$\begin{aligned}\Psi_{links}(x) &= A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \\ \Psi_{rechts}(x) &= C e^{ik_2 x}.\end{aligned}$$

Die Bedingung

$$\Psi_{links}(0) = \Psi_{rechts}(0)$$

führt zu

$$A + B = C$$

und

$$\Psi'_{links}(0) = \Psi'_{rechts}(0)$$

führt zu

$$(A - B)k_1 = Ck_2.$$

Wir haben somit 2 Gleichungen und drei freie Parameter (A, B, C). Die dritte Gleichung wird durch die Anfangs- Rand- oder Normierungsbedingung geliefert, die wir aber hier nicht diskutieren. Wir betrachten die gesamte Wellenfunktion hier als nicht normiert, wodurch einer der Parameter frei bleibt. Wir wählen dafür A als die Amplitude einer Welle, die auf die Grenzfläche einfällt, und berechnen B und C als die Amplituden der reflektierten, resp. transmittierten Welle.

3.3.3 Reflexion und Transmission

Wir suchen nun den Transmissionskoeffizienten $t = C/A$ und den Reflexionskoeffizienten $r = B/A$. Wir eliminieren zunächst C und erhalten daraus den Reflexionskoeffizienten r :

$$\begin{aligned}(A - B)k_1 &= (A + B)k_2 \\ A(k_1 - k_2) &= B(k_1 + k_2) \\ r &= \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.\end{aligned}$$

Analog eliminieren wir B erhalten daraus den Transmissionskoeffizienten t :

$$\begin{aligned}(A - C + A)2k_1 &= Ck_2 \\ 2Ak_1 &= C(k_1 + k_2) \\ t &= \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = 1 + r,\end{aligned}$$

wie wir das schon im Wintersemester für eindimensionale Wellen gefunden hatten.

Während ein klassisches Teilchen an einer Potenzialstufe einfach langsamer wird, wird ein quantenmechanisches Teilchen offenbar aufgeteilt: ein Teil wird reflektiert, ein anderer Teil transmittiert. Die reflektierte Teilwelle interferiert außerdem mit der einlaufenden Teilwelle.

3.3.4 Teilchenenergie groß

Wir betrachten zunächst den Fall $\mathcal{E} > U_0$, wo die Energie des Teilchens größer ist als die Höhe des

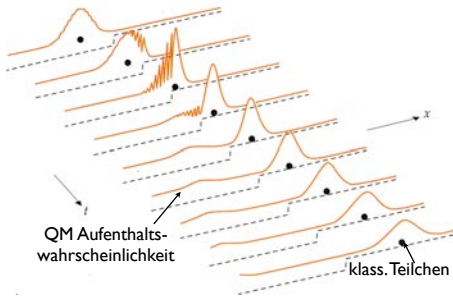


Abbildung 3.10: Verhalten eines klassischen Teilchens und eines quantenmechanischen Wellenpaketes an einer Potenzialstufe.

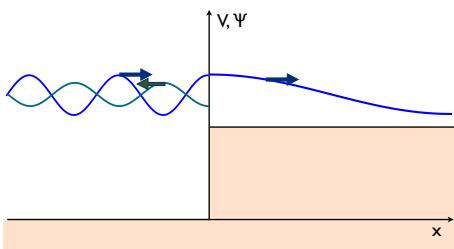


Abbildung 3.11: Zustand an der Stufe für große Energie des einfallenden Teilchens.

Potenzials. Ein klassisches Teilchen würde in diesem Fall durch die Potenzialstufe gebremst, aber es wird weiter laufen. Aufgrund der Welleneigenschaften der Materie erhalten wir in diesem Fall aber eine teilweise Reflexion, d.h. in beiden Bereichen jeweils eine Welle, die von der Potenzialstufe wegläuft.

Für sehr hohe Energien, $\mathcal{E} \gg U_0$, werden die beiden Wellenvektoren fast gleich, $k_1 \approx k_2$, so dass der Reflexionskoeffizient

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \rightarrow 0$$

gegen Null geht, d.h. das Teilchen "spürt" die Schwelle kaum noch, es wird nicht mehr reflektiert. Der Transmissionskoeffizient

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \rightarrow 1$$

geht asymptotisch gegen 1.

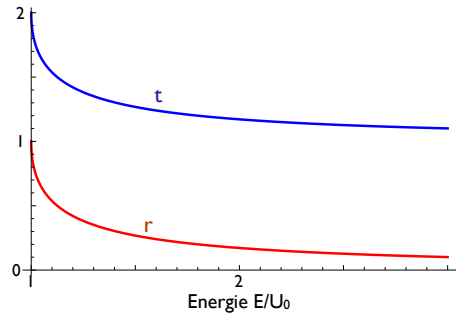


Abbildung 3.12: Reflexions- und Transmissionskoeffizienten als Funktion der Energie.

Für niedrigere Energien nimmt der Wellenvektor k_2 rascher ab als k_1 und geht an der Schwelle gegen 0. Der Reflexionskoeffizient

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \rightarrow 1$$

erreicht damit eins, d.h. das Teilchen wird nun vollständig reflektiert.

Der Transmissionskoeffizient geht jedoch nicht gegen null, er steigt im Gegenteil mit abnehmendem k_2 an und erreicht an der Schwelle

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \rightarrow 2$$

den Wert 2. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in der rechten Hälfte zu finden, wird damit maximal.

3.3.5 Teilchenstromdichte

Dieses Verhalten erscheint auf den ersten Blick wenig intuitiv, da wir eine Erhaltung der Ladung und damit der Teilchenzahl erwarten. Die Teilchendichte wird allerdings nicht durch r und t , und damit durch die Amplituden A, B und C beschrieben, sondern durch deren Quadrate. Auch die Teilchendichten $(A+B)^2$ und C^2 auf beiden Seiten der Barriere sind jedoch unterschiedlich.

Allerdings gilt für die Teilchendichte kein Erhaltungsgesetz. Die entscheidende Erhaltungsgröße ist

in diesem Fall die Zahl der Teilchen als Funktion der Zeit. Eine laufende Welle stellt einen Strom von Teilchen dar. Die Erhaltung der Teilchenzahl bedeutet damit, dass die Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit auf die Grenzfläche einfallen, gleich der Summe aus der Teilchenzahl sein muss, die sich in der gleichen Zeiteinheit von der Grenzfläche nach links und rechts entfernen. Dies ist einerseits durch die Teilchendichten $B^2 = A^2 r^2$ und $C^2 = A^2 t^2$ gegeben, andererseits durch die Geschwindigkeiten der Teilchen, welche $\propto k$ sind.

Wir Berechnen die Teilchenstromdichte aus der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi(x)|^2$ und der Geschwindigkeit $v = p/m$:

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi).$$

Wir finden für eine ebene Welle und eine reelle Wellenzahl k

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= A e^{ikx} \\ \Psi^*(x) &= A^* e^{-ikx} \end{aligned}$$

eine Stromdichte

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2im} |A|^2 (e^{-kx} i k e^{ikx} - (-ik) e^{-ikx} e^{ikx}) \\ &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \end{aligned}$$

Somit betragen die Stromdichten für die drei beteiligten Wellen

$$\begin{aligned} j_A &= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \\ j_B &= -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 = -\frac{\hbar k_1}{m} |r|^2 |A|^2 = -|r|^2 j_A \\ j_C &= \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 = \frac{\hbar k_2}{m} |rt|^2 |A|^2 = |t|^2 j_A \frac{k_2}{k_1}. \end{aligned}$$

Erhaltung der Teilchenzahl bedeutet

$$j_A = -j_B + j_C$$

oder

$$\frac{-j_B + j_C}{j_A} = 1.$$

Im vorliegenden Fall ist dieses Verhältnis gegeben durch

$$|r|^2 + |t|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1,$$

d.h. das Erhaltungsgesetz ist erfüllt. Dies ist in strenger Analogie zur Erhaltung der Energiedichte bei der Reflexion und Transmission einer klassischen elektromagnetischen Welle, welche wir im Wintersemester diskutiert hatten. Die höhere Teilchendichte auf der rechten Seite, wo die Amplitude bis zum Doppelten der Amplitude der einfallenden Welle wird, kommt somit durch die stark reduzierte Geschwindigkeit zustande, wenn die kinetische Energie $\mathcal{E} - U_0$ gegen Null geht: Die Teilchenstromdichte geht in diesem Fall gegen 0.

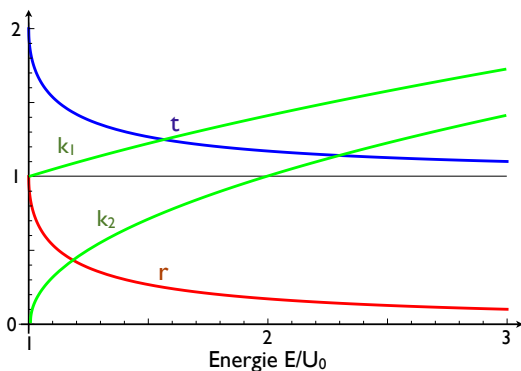


Abbildung 3.13: Abhängigkeit des Impulses von der Energie auf beiden Seiten der Stufe.

Die unterschiedliche Abhängigkeit der Teilchengeschwindigkeit von der Energie auf den beiden Seiten der Stufe führt dazu, dass sich Teilchendichte und Teilchenstromdichte unterschiedlich verhalten.

Wir können uns z.B. einen Teilchenstrom vorstellen, welcher von links auf die Barriere trifft. Wir nehmen an, dass die kinetische Energie der Teilchen knapp oberhalb der Barriere liegt. Der Reflexionskoeffizient liegt nahe bei 1, d.h. die meisten Teilchen werden reflektiert und fliegen mit dem gleichen Impuls, d.h. mit der gleichen Geschwindigkeit zurück. Einige wenige werden in die rechte Hälfte transmittiert, wobei ihre Energie praktisch vollständig von kinetischer Energie in potenzielle Energie umgewandelt

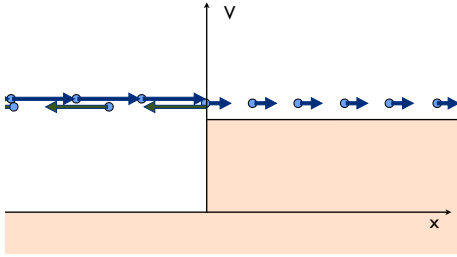


Abbildung 3.14: Geschwindigkeit und Teilchendichte.

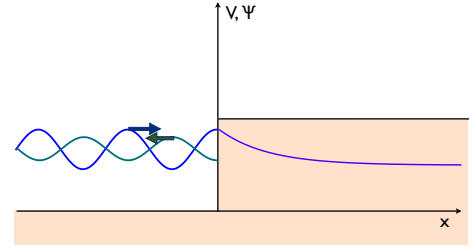


Abbildung 3.15: Zustand an der Stufe für Teilchenenergie kleiner als U .

wird. Ihre Geschwindigkeit wird somit sehr klein. Obwohl nur wenige Teilchen pro Zeiteinheit auf die rechte Seite der Stufe gelangen, wird ihr mittlerer Abstand klein, da sie sich mit geringer Geschwindigkeit bewegen.

3.3.6 Teilchenenergie gleich potenzieller Energie

Ist die Energie des Teilchens gerade gleich der potenziellen Energie ist, $\mathcal{E} = U_0$, verschwindet k_2 . Offenbar wird in diesem Fall der Reflexionskoeffizient gleich 1, der Transmissionskoeffizient wird 2.

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \rightarrow 1 \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \rightarrow 2.$$

Trotz verschwindender Teilchenstromdichte ist auf der rechten Seite im stationären Fall eine maximale Teilchendichte vorhanden.

3.3.7 Teilchenenergie kleiner als potenzielle Energie

Für den Fall $\mathcal{E} < U_0$, also für den Fall dass die Energie kleiner ist als das Potenzial, erwarten wir klassisch, dass das Teilchen nicht in den Raum rechts des Ursprungs eindringen kann. Quantenmechanisch bleibt die obige Lösung gültig, d.h. die Wellenfunktion Ψ hat auch im rechten Halbraum eine endliche Amplitude. Dies bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im rechten Halbraum zu finden, nicht null ist - ein klarer Widerspruch zur klassischen Mechanik, wo ein Teilchen mit einer bestimmten

Energie sich nie in einem Bereich aufhalten kann, wo seine potenzielle Energie größer ist als seine Gesamtenergie.

Allerdings wird der Wellenvektor

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} - U_0)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(U_0 - \mathcal{E})}}{\hbar} = i\kappa$$

dann imaginär. Mathematisch haben wir hier somit 2 mögliche Lösungen,

$$\Psi_{II} = B e^{\pm \kappa x}.$$

Das positive Vorzeichen, welches einer exponentiell ansteigenden Funktion entsprechen würde, ist aber physikalisch nicht sinnvoll. Es bleibt somit das negative Vorzeichen, das einer exponentiell gedämpften Funktion entspricht. Der Betrag κ des Wellenvektors gibt die inverse Eindringtiefe an: für $\mathcal{E} = U_0$ verschwindet κ , d.h. die Zustandsfunktion ist konstant im rechten Halbraum. Für kleinere Energien nimmt die Eindringtiefe mit der Wurzel aus der Energiedifferenz ab.

Die Größenordnung der Eindringtiefe ist bestimmt durch das Produkt aus Masse und Energie. Handelt es sich bei beiden um kleine Beträge, so erhalten wir eine große Eindringtiefe. Als Beispiel betrachten wir Elektronen, deren Energie 0.1 eV unterhalb der Potenzialstufe liegt. Dann wird der Wellenvektor

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\sqrt{2m(U_0 - \mathcal{E})}}{\hbar} \\ &\approx \frac{\sqrt{2 \cdot 10^{-30} \cdot 1.6 \cdot 10^{-20}}}{10^{-34}} \\ &\approx \frac{10^{-25}}{10^{-34}} = 10^9 \text{ m}^{-1}, \end{aligned}$$

d.h. die Eindringtiefe liegt in der Größenordnung von 1 nm.

Wir betrachten auch dafür die Stromdichte. Für

$$\Psi = C e^{-\kappa x}$$

und

$$\Psi^* = C^* e^{-\kappa x}$$

wird

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} \left(C^* e^{-\kappa x} C e^{-\kappa x} (-\kappa) - C^* e^{-\kappa x} C e^{-\kappa x} (-\kappa) \right) \\ &= 0, \end{aligned}$$

d.h. die Stromdichte verschwindet: im stationären Zustand dringen keine Elektronen in den "verbotenen" Bereich ein.

3.3.8 Reflexion

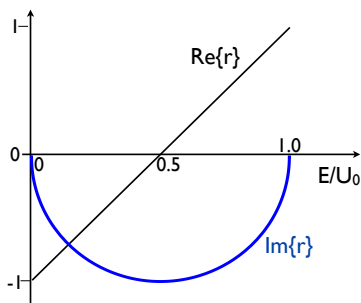


Abbildung 3.16: Komplexer Reflexionskoeffizient als Funktion der Energie.

Der Reflexionskoeffizient

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa}$$

ist in diesem Energiebereich komplex, d.h. die einlaufende und die reflektierte Welle sind i.a. außer Phase. Im Bereich hoher Energie, $\mathcal{E} \approx U_0$, sind sie

in Phase, bei $\mathcal{E} = U_0/2$, wo $k_1 = \kappa$, sind sie um 90 Grad außer Phase, und bei $\mathcal{E} = 0$, wo $k_1 \ll \kappa$ gegen κ vernachlässigt werden kann, erreicht r den Wert -1. Die beiden Wellen sind dann in Gegenphase. Über den gesamten Bereich ist der Betrag des Reflexionskoeffizienten =1, d.h. die Welle wird vollständig reflektiert.

Dies bedeutet, dass die Amplitude der Gesamtwelle, d.h. der Summe aus einlaufender und reflektierter Welle an der Potenzialstufe in diesem Fall verschwindet. Dies entspricht der Situation, die wir im unendlich hohen Potenzialtopf erlebt hatten. Die dort aufgestellte Forderung, dass $\Psi(0) = 0$ sein müsse, wird hier somit als Spezialfall erhalten.

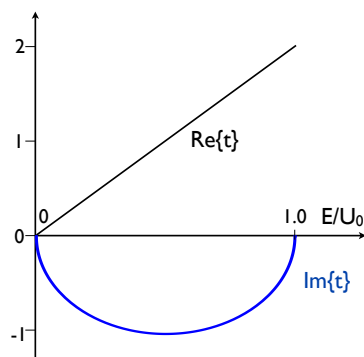


Abbildung 3.17: Komplexer Transmissionskoeffizient als Funktion der Energie.

Der Transmissionskoeffizient

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa}$$

zeigt einen qualitativ ähnlichen Verlauf. Auch er ist in diesem Bereich komplex. Für niedrige Energien oder hohe Potentiale geht κ gegen unendlich und t somit gegen Null. Der Transmissionskoeffizient verschwindet also für sehr hohe Potenzialstufen, so dass dann nicht nur die Eindringtiefe, sondern auch die Amplitude der Zustandsfunktion im Bereich des hohen Potentials verschwindet.

3.3.9 Zusammenfassung

Dieses Phänomen spielt also vor allem für leichte Teilchen, geringe Potenzialstufen, und kleine Distanzen eine Rolle. Am besten bekannt ist es in der

Optik, wo wir es bereits diskutiert hatten, nämlich bei der Totalreflexion von Licht bei interner Reflexion, wenn der Lichtstrahl oberhalb des kritischen Winkels auf die Grenzfläche auftrifft. Da Photonen keine Ruhemasse haben, besitzen sie relativ große Eindringtiefen. Die sogenannte evaneszente Welle fällt im zweiten Halbraum exponentiell ab.

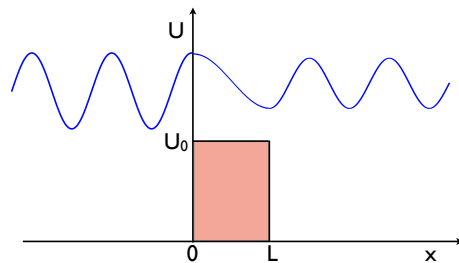


Abbildung 3.19: Potenzialwall.

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{für } 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Achse ist somit in drei Teilbereiche aufgeteilt, die wiederum freie Ausbreitung erlauben. In allen drei Teilbereichen ist die Zustandsfunktion gegeben durch ebene Wellen.

Wir betrachten wie im vorhergehenden Kapitel den Fall, dass ein Teilchen von links auf diese Barriere auftrifft. Aus dem Resultat des vorherigen Kapitels erwarten wir, dass an den beiden Potenzialstufen jeweils eine Aufspaltung in zwei Teilwellen geschieht, von denen die eine reflektiert, die andere transmittiert wird. Wir erwarten somit insgesamt 5 Teilwellen:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= a e^{ik_1 x} + b e^{-ik_1 x} && \text{für } x < 0 \\ \Psi_{II}(x) &= c e^{ik_2 x} + d e^{-ik_2 x} && \text{für } 0 < x < L \\ \Psi_{III}(x) &= f e^{ik_1 x} && \text{für } x > L. \end{aligned}$$

Die Wellenvektoren sind wiederum

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} - U_0)}}{\hbar},$$

Abbildung 3.18: Reflexion und Transmission an der Stufe.

In Abb. 3.18 ist das Verhalten nochmals zusammengestellt, oben für den Fall, dass die Energie oberhalb der Schwelle liegt, unten für eine Energie unterhalb der Schwelle. Die schwarze Linie stellt jeweils die gesamte Amplitude dar, die blaue die einlaufende und die rote die reflektierte Welle. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist im linken Halbraum eine Überlagerung zwischen einer stehenden und einer laufenden Welle. Im rechten Halbraum ist sie bei hoher Energie homogen, bei niedriger Energie fällt sie exponentiell ab.

3.4 Der Potenzialwall

3.4.1 Das Potenzial

Wir diskutieren als nächstes ein Potenzial, welches eine Art Wall darstellt:

3.4.2 Gesamtlösung

Die Koeffizienten werden wiederum aus der Stetigkeitsbedingung für die Funktion und ihre erste Ableitung bestimmt: bei $x = 0$ gilt

$$\begin{aligned} \Psi_I(0) &= a + b = \Psi_{II}(0) = c + d \\ \Psi'_I(0) &= ik_1(a - b) = \Psi'_{II}(0) = ik_2(c - d) \end{aligned}$$

und bei $x = L$

$$\begin{aligned}\Psi_{II}(L) &= c e^{ik_2L} + d e^{-ik_2L} \\ &= \Psi_{III}(L) = f e^{ik_1L} \\ \Psi'_{II}(L) &= ik_2(c e^{ik_2L} - d e^{-ik_2L}) \\ &= \Psi'_{III}(L) = ik_1 f e^{ik_1L}.\end{aligned}$$

Wir interessieren uns nun für folgende Situation: ein Teilchen fällt von links auf die Barriere ein; dies entspricht der Teilwelle $a e^{ik_1x}$. Wir erwarten, dass die entsprechende Welle teilweise reflektiert wird, ein Teil wird aber in die Barriere eindringen, resp. sie überqueren, und hinter der Barriere als freies Teilchen mit der gleichen Wellenlänge und Energie wie vor der Barriere weiterlaufen. Wir müssen lediglich den Transmissionskoeffizienten bestimmen, also das Verhältnis von f/a , resp. den Reflexionskoeffizienten b/a .

Wir eliminieren deshalb die Koeffizienten c und d , die uns hier vorläufig nicht interessieren. Aus den Stetigkeitsbedingungen für die zweite Grenzfläche

$$\begin{aligned}k_2(c e^{ik_2L} + d e^{-ik_2L}) &= k_2 f e^{ik_1L} \\ k_2(c e^{ik_2L} - d e^{-ik_2L}) &= k_1 f e^{ik_1L}\end{aligned}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned}c &= f \frac{k_1 + k_2}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)L} \\ d &= f \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)L}.\end{aligned}$$

Aus den beiden Kontinuitätsgleichungen für die erste Grenzfläche

$$a + b = c + d$$

und

$$a - b = \frac{k_2}{k_1}(c - d)$$

eliminieren wir zunächst b

$$a = c \frac{k_1 + k_2}{2k_1} + d \frac{k_1 - k_2}{2k_1}.$$

Hier benutzen wir die Ausdrücke für c und d

$$\begin{aligned}a &= f \left[\frac{(k_1 + k_2)^2}{4k_1k_2} e^{i(k_1 - k_2)L} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(k_1 - k_2)^2}{4k_1k_2} e^{i(k_1 + k_2)L} \right].\end{aligned}\quad (3.2)$$

3.4.3 Teilchenenergie oberhalb der Barriere

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen den Potenzialwall überquert, ist gegeben durch das Quadrat des Verhältnisses f/a ,

$$T = |t|^2 = \left| \frac{f}{a} \right|^2.$$

Wir betrachten zunächst den Fall, dass die Teilchenenergie weit oberhalb der Barriere liegt, $\mathcal{E} \gg U_0$. In diesem Grenzfall werden die beiden Wellenvektoren praktisch gleich, $k_1 \approx k_2$, und der Ausdruck vereinfacht sich zu $a = f$, d.h. das Teilchen überquert den Wall mit Wahrscheinlichkeit 1.

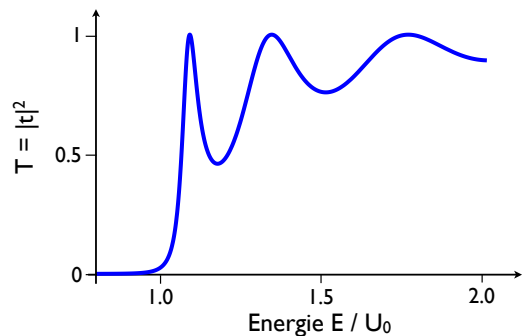


Abbildung 3.20: Transmissionswahrscheinlichkeit eines Elektrons durch eine Barriere der Dicke $L=2$ nm und Höhe $U_0=1$ eV als Funktion der Energie.

Für niedrigere Energien finden wir eine Oszillation, deren Amplitude vom Verhältnis der Wellenvektoren abhängt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit erreicht immer dann 1, den Maximalwert, wenn die beiden Phasen gleich sind, d.h. wenn

$$k_2L = n\pi \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

oder

$$\lambda_2 = \frac{2L}{n}.$$

Diese Bedingung entspricht gerade der Ausbildung stehender Wellen innerhalb der Barriere. Man kann dies als Interferenzeffekt verstehen: die Teilwellen, welche aufgrund der Mehrfachreflexion in der Barriere entstehen, sind unter dieser Bedingung in Phase und addieren sich deshalb.

3.4.4 Tunnelprozesse

Ist die Energie niedriger als die Potenzialstufe, so wird der Wellenvektor im Bereich der Barriere imaginär, d.h. die Amplitude der Wellenfunktion fällt exponentiell ab. Bei endlicher Höhe und Breite der Barriere erhalten wir aber trotzdem eine nicht verschwindende Amplitude auf der Rückseite der Barriere.

Wir schreiben für den Wellenvektor im Bereich der Barriere wiederum

$$k_2 = i\kappa = i \frac{\sqrt{2m(U_0 - \mathcal{E})}}{\hbar}.$$

Wir setzen das in Gl. (3.2) ein und erhalten

$$a = \frac{f e^{ik_1 L}}{4k_1 i\kappa} [(k_1 + i\kappa)^2 e^{\kappa L} - (k_1 - i\kappa)^2 e^{-\kappa L}].$$

Ist die Energie des Teilchens genügend weit von der Energie der Barriere entfernt, so wird $\kappa L \gg 1$ und wir können $e^{-\kappa L}$ gegenüber $e^{\kappa L}$ vernachlässigen und erhalten

$$a = f e^{ik_1 L} e^{\kappa L} \frac{(k_1 + i\kappa)^2}{4k_1 i\kappa}.$$

Dieser Faktor divergiert bei $\mathcal{E} = 0$ und $\mathcal{E} = U_0$, wo k_1 , resp. k_2 gegen null gehen. Im übrigen Bereich ist er von der Größenordnung 1. Das Verhalten bezüglich Transmission wird somit vom exponentiellen

Term $e^{\kappa L}$ bestimmt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = |t|^2 = \left| \frac{f}{a} \right|^2 \propto e^{-2\kappa L}$$

dass ein Teilchen auf der anderen Seite der Barriere auftaucht, sinkt damit exponentiell mit der Länge der Barriere. Dies bedeutet, dass in der Quantenmechanik Teilchen, deren Energie zu niedrig ist um die Barriere zu überqueren, sie "durchtunneln" können. Man bezeichnet solche Prozesse deshalb als Tunnelprozesse. Sie stellen eines der charakteristischen Prozesse der Quantenmechanik dar und finden inzwischen eine Reihe von Anwendungen.

3.4.5 Übersicht über die Lösungsfunktion

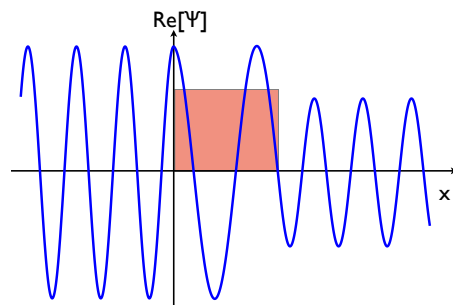


Abbildung 3.21: Lösung für Einfallenergie oberhalb der Barriere.

Für Energien oberhalb der Barriere ($\mathcal{E} = 1.5$ eV) erhalten wir in allen drei Bereichen eine oszillierende Ortsabhängigkeit.

Unterhalb der Barriere ($\mathcal{E} = 0.95$ eV) sehen wir einen exponentiellen Zerfall im Bereich der Barriere und eine sehr viel kleinere Amplitude rechts davon.

3.4.6 Teilchenstromdichte in der Barriere

Wir hatten bei der Potenzialstufe gesehen, dass die Stromdichte in der evaneszenten Welle verschwindet. Damit stellt sich die Frage, wie die Teilchen

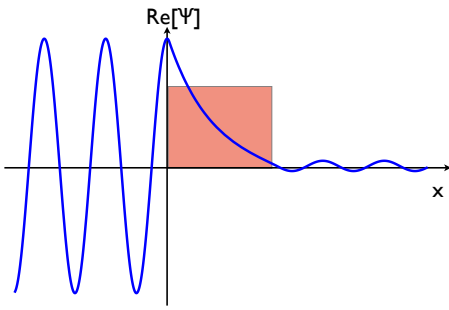


Abbildung 3.22: Lösung für Einfallenergie unterhalb der Barriere.

durch die Barriere gelangen. Wir berechnen deshalb die Stromdichte in der Barriere als

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi),$$

wobei wir für die Wellenfunktion

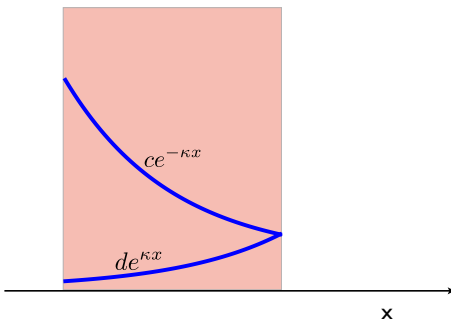


Abbildung 3.23: Koeffizienten in der Barriere.

$$\Psi = ce^{-\kappa x} + de^{\kappa x}$$

verwenden. Wir erhalten

$$j = \frac{\hbar}{2im} [(c^* e^{-\kappa x} + d^* e^{\kappa x}) \cdot (-\kappa c e^{-\kappa x} + \kappa d e^{\kappa x}) - (-\kappa c^* e^{-\kappa x} + \kappa d^* e^{\kappa x}) \cdot (c e^{-\kappa x} + d e^{\kappa x})]$$

Ausmultiplizieren zeigt, dass die Terme mit c^*c , resp. d^*d verschwinden:

$$j = \frac{\hbar}{2im} [c^* e^{-\kappa x} \kappa d e^{\kappa x} - \kappa c e^{-\kappa x} d^* e^{\kappa x}].$$

$$= \frac{\hbar \kappa}{im} (c^* d - c d^*) = 2 \frac{\hbar \kappa}{m} \Im \{c^* d\}.$$

Der Tunnelstrom kommt also gerade durch die Korrelation zwischen den beiden exponentiell abfallenden Beiträgen zustande, also durch die Mehrfachreflexion.

3.4.7 Tunneleffekt mit Mikrowellen

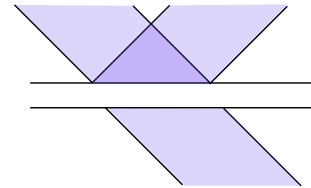


Abbildung 3.24: Frustrierte Totalreflexion.

Ein solches Verhalten kann auch im Bereich der Optik erzeugt werden, wenn man unter den Bedingungen der Totalreflexion einen zweiten Glaskörper in die Nähe der Oberfläche bringt, so dass dieser in die evaneszente Welle hineinragt und das Lichtfeld sich wiederum frei ausbreiten kann. Dies wird als frustrierte Totalreflexion bezeichnet und entspricht einem Tunnelprozess der Photonen. Dieser Effekt ist in der Optik gut bekannt und wird z.B. bei der Herstellung von Polarisatoren benutzt: Für doppelbrechende Materialien kann man die Bedingungen so wählen, dass die eine Polarisation tunneln kann, die andere nicht.

Exp: Tunneln von Mikrowellen

Da die Dimensionen bei einem optischen Experiment relativ klein sind, sind Mikrowellen für eine Demonstration besser geeignet. Das Material ist in diesem Fall aus Paraffin, was einen Brechungsindex von ca. 1.5 aufweist, so dass Wellen, die unter einem Winkel von 45 Grad einfallen, vollständig reflektiert werden. Die Wellenlänge der Mikrowellen beträgt $\lambda = 2.8$ cm. Wir erwarten deshalb eine evaneszente Welle, die einige cm aus dem Prisma hinausragt. Wenn wir in dieses Gebiet ein zweites Prisma bringen, so können die Wellen durch die Luft hindurch

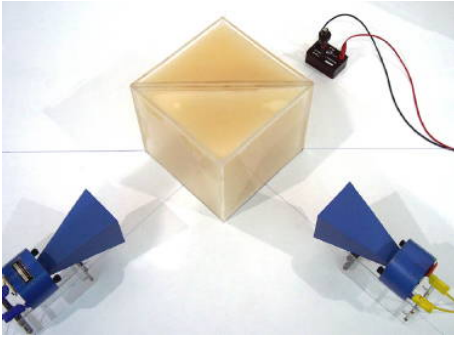


Abbildung 3.25: Tunneln von Mikrowellen durch einen Luftspalt.

tunneln. Die Transmissionswahrscheinlichkeit hängt exponentiell vom Abstand der beiden Prismen ab.

3.4.8 Beliebige Barrieren: WKB-Methode

Hier haben wir die Transmissionswahrscheinlichkeit durch eine rechteckige Barriere ausgerechnet. Dies ist zwar mathematisch relativ angenehm, entspricht aber keinem realistischen physikalischen Fall. Wirkliche Potenziale sind kontinuierlich, und die Ausbreitung in solchen Potenzialen ist mathematisch schwierig zu behandeln.

Wie wir gesehen haben, sind ortsabhängige Potenziale leicht zu behandeln, wenn sie über einen gewissen Bereich als konstant angenähert werden können. Deshalb haben wir bisher auch nur solche Potenziale behandelt. Als nächste Näherung kann man annehmen, dass das Potenzial langsam variiert, aber die Änderungen über eine Wellenlänge von Ψ vernachlässigbar sind. Diese Näherung ist als WKB-Methode (für Wenzel, Kramers, Brillouin) bekannt. Wir verwenden sie hier um die Tunnelwahrscheinlichkeit für ein beliebiges Potenzial zu berechnen.

Hier wird das kontinuierliche Potenzial in eine Reihe von Schichten mit konstantem Potenzial aufgeteilt, und zwar so, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit für die einzelnen Scheiben sich leicht berechnen lässt. Die gesamte Transmissionswahrscheinlichkeit wird dann als Produkt der Transmissionswahrscheinlichkeiten für die einzelnen Schichten be-

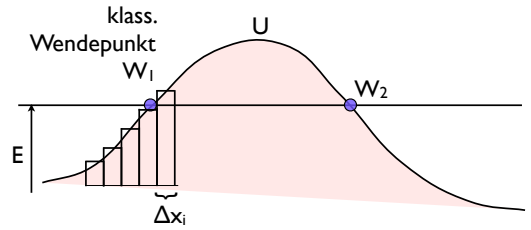


Abbildung 3.26: Stufenförmige Näherung für den Potenzialverlauf.

rechnet,

$$t = t_1 t_2 t_3 \dots t_m.$$

Der Transmissionskoeffizient für ein einzelnes Segment ergibt sich aus dem exponentiellen Abfall der Wellenfunktion in diesem Bereich zu

$$t_i = e^{-\kappa_i \Delta x_i}$$

oder

$$\ln(t_i) \approx -\kappa_i \Delta x_i.$$

Für die gesamte Transmissionswahrscheinlichkeit erhält man damit

$$\begin{aligned} \ln(t) &= \sum_i \ln(t_i) = -\sum_i \kappa_i \Delta x_i \\ &= -\int_{W_1}^{W_2} \kappa(x) dx. \end{aligned}$$

Damit wird die Transmissionswahrscheinlichkeit in der WKB-Näherung, ausgedrückt durch das Potenzial $U(x)$

$$t = e^{-\int_{W_1}^{W_2} \kappa(x) dx} = e^{-\int_{W_1}^{W_2} \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} dx}.$$

Die Integration läuft dabei über den gesamten klassisch verbotenen Bereich, d.h. vom linken bis zum rechten Wendepunkt. Sie hängt somit exponentiell von der Energie des Teilchens ab, und von seiner Masse. Leichtere Teilchen tunneln somit besser als schwerere. Nimmt die Energie \mathcal{E} zu, so steigt die Transmission aus zwei Gründen: zum einen wird

der Integrand kleiner, zum andern der Integrationsbereich.

Aufgrund der Massen- und Energieabhängigkeit sind Tunnelprozesse für die leichtesten Teilchen am wichtigsten: besonders Elektronen und Protonen. Da die Tunnelwahrscheinlichkeit exponentiell von der Masse abhängt, findet man hier riesige Isotopeneffekte: Die Tunnelraten für Deuterium sind gegenüber Wasserstoff immer sehr viel kleiner.

Für makroskopische Körper wird die Tunnelwahrscheinlichkeit vernachlässigbar klein. Dabei spielt die Energie die kleinere Rolle. Wir können die Tunnelwahrscheinlichkeit für einen makroskopischen Körper ($m=1\text{kg}$) gegenüber einem Elektron ($m_e = 10^{-30}\text{ kg}$) bei gleichem Potenzial vergleichen: Das Verhältnis sollte

$$t_{\text{mak}} = t_{\text{mik}} \sqrt{m/m_e}$$

sein.

3.5 Phänomenologie des Tunnelprozesses

Quantenmechanische Tunnelprozesse spielen in vielen Gebieten eine Rolle. Hier soll eine kurze Übersicht über die wichtigsten Tunnelprozesse gegeben werden.

3.5.1 α -Zerfall

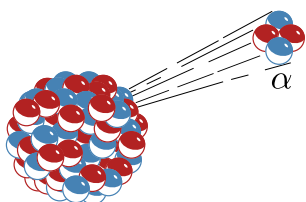
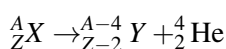


Abbildung 3.27: α -Zerfall.

Als erstes Beispiel diskutieren wir den radioaktiven α -Zerfall. Dabei zerfällt ein Atomkern nach dem Schema



d.h. ein Kern X mit Massenzahl A und Ordnungszahl Z emittiert einen Heliumkern.

Exp: α -Zerfall

Der α -Zerfall kommt bei vielen Kernen in der Natur vor und kann mit verschiedenen Detektoren nachgewiesen werden. Die α -Teilchen, d.h. He-Kerne sind relativ schwer und haben deshalb eine beschränkte Reichweite.

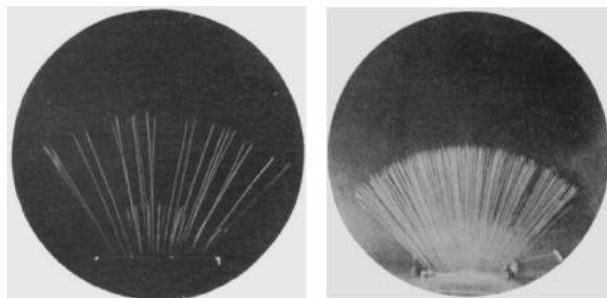


Abbildung 3.28: Spuren des α -Zerfalls in einer Nebelkammer.

Wenn man sie in einer Nebelkammer sichtbar macht, wird leicht ersichtlich, dass alle Teilchen, die aus dem gleichen Zerfall stammen, etwa gleich weit fliegen. Die Distanz, welche sie zurücklegen, ist direkt proportional zu ihrer Energie. Aus dieser Messung können wir erkennen, dass alle Teilchen, die beim Zerfall dieses Kerns entstehen, die gleiche kinetische Energie aufweisen.

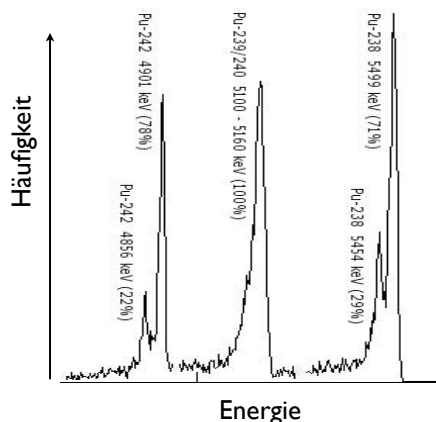


Abbildung 3.29: Energieverteilung der α -Teilchen.

Im Allgemeinen findet man, dass einige wenige Energien auftreten, die Verteilung in der Nähe dieser Energien ist aber relativ schmal. Wie auf der Nuklidkarte gezeigt, gibt es vor allem bei den schweren Elementen Isotope, die unter Emission von α -Strahlung zerfallen.

Die mittlere Lebensdauer eines Kerns, der α -Teilchen emittiert, ist sehr unterschiedlich. Für $^{212}_{84}\text{Po}$ beträgt es z.B. $3 \cdot 10^{-7}$ s, für $^{238}_{92}\text{U}$ beträgt es z.B. $4.5 \cdot 10^9$ Jahre, also etwas gleich dem Alter der Erde. Ihre Energie beträgt typischerweise 4-10 MeV. Man beobachtet außerdem eine Korrelation von Energie und Lebensdauer: Je größer die Energie, desto kürzer die Lebensdauer des Mutterkerns.

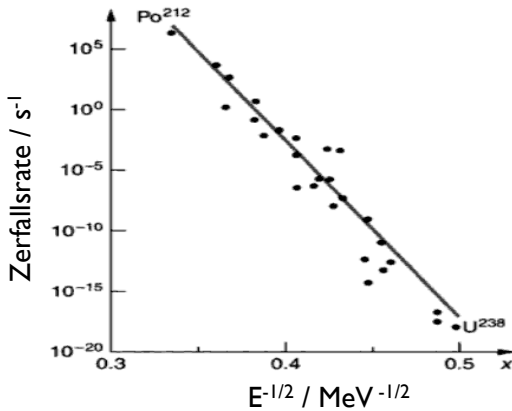


Abbildung 3.30: Zerfallsrate der Kerne gegen Energie der α -Teilchen.

In Abb. 3.30 sind die Zerfallsraten (d.h. inverse Lebensdauern) gegen die Wurzel aus der inversen Energie der α -Teilchen aufgetragen. Die Gerade markiert somit eine Beziehung

$$\ln(\tau) \propto \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}}},$$

welche offenbar über etwa 25 Größenordnungen der Zerfallszeiten gültig bleibt.

3.5.2 Modell des α -Zerfalls

Wir können für diesen Prozess ein grob vereinfachtes Modell aufstellen, indem wir das α -Teilchen

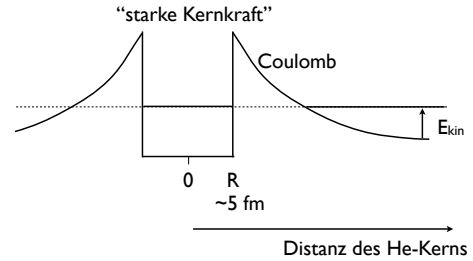


Abbildung 3.31: Einfaches Modell für den Verlauf der potenziellen Energie der α -Teilchen als Funktion des Abstandes vom Kern.

als unabhängiges Teilchen betrachten, welches im Ursprungskern in einem Potenzialtopf festgehalten wird. Wenn wir die potenzielle Energie des α -Teilchens als Funktion des Abstandes vom Atomkern darstellen. Im Kern wird das α -Teilchen von starken Kernkräften festgehalten, es sitzt in einer Potenzialmulde. Diese Kernkräfte besitzen aber nur eine kurze Reichweite. Wir können uns vorstellen, dass sie nur innerhalb des Kerns existieren und an seiner Oberfläche abrupt auf Null gehen. Der Kernradius R lässt sich abschätzen als

$$R \approx \sqrt[3]{A} \cdot 1.2 \text{ fm.}$$

Auf einer größeren Skala dominieren die langreichweitigen Coulomb-Kräfte, welche zu einer Abstoßung führen. In einem instabilen Kern ist die ursprüngliche Energie des α -Teilchens positiv, also höher als für einen sehr großen Abstand. Aufgrund des Tunneleffektes gelingt es deshalb einigen α -Teilchen, den Kern zu verlassen.

Wenn die α -Teilchen den Kern "verlassen", d.h. mit einer Energie \mathcal{E} aus dem Tunnel herauskommen, können wir in guter Näherung die Kernkräfte vernachlässigen. Das System der beiden Teilkerne mit Ladung $Z - 2$ und 2 besitzt somit an dieser Stelle nur elektrostatische Energie

$$\mathcal{E}_C = (Z - 2) \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 b}.$$

Hier stellt b den Abstand dar, bei dem das α -Teilchen aus dem Tunnel kommt. Dies ist die Energie, die wir messen, und die sie auch innerhalb

des Kerns besitzen. Wir können aus der gemessenen Energie somit die Distanz b messen, bei der die "Tunnelstrecke" endet:

$$b = (Z - 2) \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0\mathcal{E}_C}.$$

Wir setzen typische Werte ein: z.B. für ${}^{238}_{92}\text{U}$: $\mathcal{E}_C = 4.2 \text{ MeV} = 6.7 \cdot 10^{-13} \text{ J}$, $Z = 92$. Damit wird der Abstand

$$\begin{aligned} b &= \frac{180 \cdot 3 \cdot 10^{-38}}{12 \cdot 10^{-11} \cdot 6.7 \cdot 10^{-13}} \text{ m} = 5 \cdot 10^{-14} \text{ m} \\ &= 50 \text{ fm}. \end{aligned}$$

Dies entspricht rund dem 10-fachen eines typischen Kernradius und bestätigt das Modell soweit, dass die elektrostatische Abstoßung am Rand des Kerns deutlich höher ist als die Energie des α -Teilchens.

Wir können nun die Wahrscheinlichkeit t^2 berechnen, dass ein Teilchen, das von links auf die Barriere auftrifft, diese durchtunnelt. Im Rahmen der WKB-Näherung erhalten wir

$$\begin{aligned} \ln(t^2) &= -2 \int_R^b dx \frac{\sqrt{2m(U(x) - \mathcal{E})}}{\hbar} \\ &= -2 \int_R^b dx \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \left(\frac{(Z-2)2e^2}{4\pi\epsilon_0 x} - \frac{(Z-2)2e^2}{4\pi\epsilon_0 b} \right)} \\ &= -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\mathcal{E}_C b} \int_R^b \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{b}} dx. \end{aligned}$$

Dabei ist $U(x)$ die Coulomb-Energie und \mathcal{E} die gemessene Teilchenenergie. Das Integral ergibt

$$\begin{aligned} &\int_R^b \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{b}} dx \\ &= \sqrt{b} \left[\cos^{-1} \sqrt{\frac{R}{b}} - \sqrt{\frac{R}{b} - \left(\frac{R}{b}\right)^2} \right]. \end{aligned}$$

Unter der Annahme dass $b \gg R$ kann dies reduziert werden zu

$$\int_R^b \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{b}} dx \approx \sqrt{b} \left[\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{b}} \right].$$

Der gesamte Ausdruck ergibt

$$\ln(t^2) = -2\sqrt{2m\mathcal{E}_C} \frac{b}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{b}} \right].$$

Um diese Formel weiter auszuwerten, benötigen wir Werte für R und Z . Wir betrachten hier in erster Linie die "typischen" α -Emitter wie Ur, Po, Ra etc., welche alle ähnliche Werte aufweisen. Für ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ z.B. erhalten wir $R = 7.3 \text{ fm}$ und $Z = 88$. Zahlen für die anderen Kerne variieren nicht sehr stark. Damit erhalten wir

$$\log_{10}(t^2) = -\frac{148}{\sqrt{\mathcal{E}_C/\text{MeV}}} + 32.5.$$

Damit haben wir die Wahrscheinlichkeit berechnet, dass ein Teilchen aus dem Kern hinaus tunnelt, falls es an die Wand stößt. Jetzt brauchen wir noch die Anzahl Stöße pro Zeiteinheit. Dafür nehmen wir an, dass das Teilchen im Kern mit der gleichen Geschwindigkeit bewegt wie außerhalb des Kerns. Damit erhalten wir als Größenordnung für die Zeit zwischen zwei Stößen mit dem Potenzialwall eine Zeit $\tau_0 \approx 10^{-21} \text{ s}$. Damit erhalten wir eine Schätzung für die Zerfallszeit

$$\tau = \tau_0/T$$

von

$$\log_{10}(\tau) = \frac{148}{\sqrt{\mathcal{E}_C/\text{MeV}}} - 53.5.$$

Dies ist, angesichts des einfachen Modells, in erstaunlich guter Übereinstimmung mit den gemessenen Daten.

3.5.3 Kernfusion

Dieser Prozess kann auch umgekehrt stattfinden, d.h. ein Kern kann die Coulomb-Barriere eines anderen Kerns durchdringen und mit ihm verschmelzen. Dieser Prozess ist für leichte Kerne energetisch günstig,

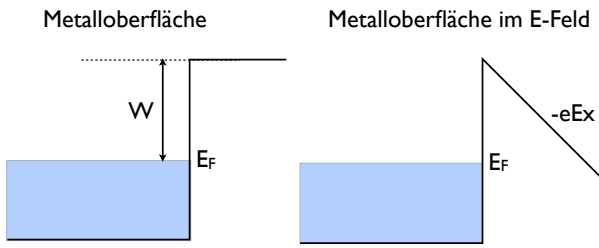


Abbildung 3.35: Potenzielle Energie für Elektronen im Metall und im Vakuum; die Differenz entspricht der Austrittsarbeit. Rechts die entsprechende Situation in einem elektrischen Feld.

An einer Metalloberfläche findet man eine Potenzialstufe: Die Elektronen müssen die Austrittsarbeit überwinden, bevor sie das Metall verlassen können. Dies ist möglich wenn die entsprechende Energie durch Photonen eingebracht wird, oder wenn das Metall geheizt wird, wie in einer Glühkathode. Wir können aber auch eine Spannung anlegen, welche die Energie der freien Zustände ortsabhängig macht. Dann wird die Austrittsarbeit zu einer Barriere, durch die die Elektronen durchtunneln können. Die wird z.B. bei der Feldemissionsmikroskopie genutzt, das Sie als Versuch gesehen hatten.

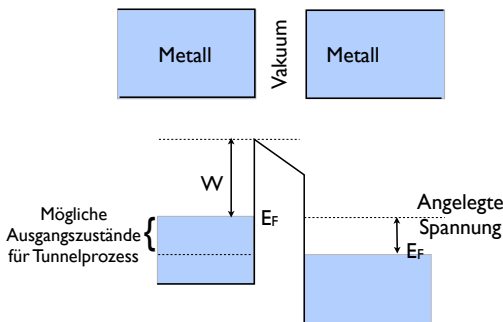


Abbildung 3.36: Tunnelprozess von Metall zu Metall durch Vakuum.

Nicht nur aus einem Metall ins Vakuum können Elektronen tunneln, sondern ebenso zwischen zwei Metallen oder von einem Metall zu einem Supraleiter oder In diesem Fall erwarten wir aus dem gelernten, dass der Widerstand dieser Vakuumstrecke exponentiell vom Abstand der beiden Metallstücke

abhängt,

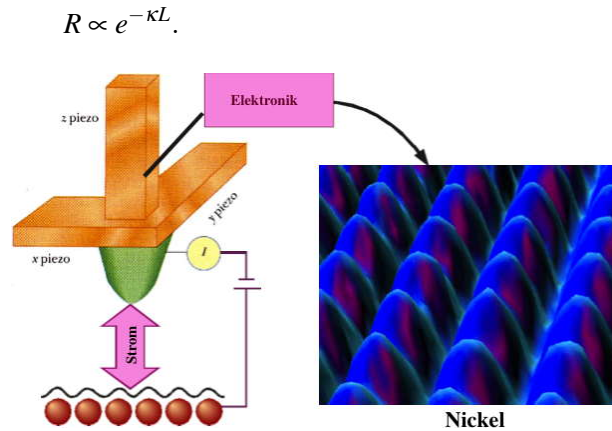


Abbildung 3.37: Prinzip der Raster-Tunnelmikroskopie; rechts das STM Bild einer Ni-Oberfläche.

Eine Anwendung davon ist die Tunnelmikroskopie. Dabei wird eine dünne metallische Spitze in die Nähe einer elektrisch leitenden Oberfläche gebracht, mit einem Abstand von etwa einem nm. Die Luft zwischen der Spitze und der Oberfläche stellt für die Elektronen eine Potenzialbarriere dar. Die Elektronen können aber durch diese Barriere tunneln. Bei konstanter Spannung fließt ein Strom, der exponentiell vom Abstand der Spitze von der Oberfläche abhängt.

Man kann diesen Effekt dazu verwenden, die Spitze in konstantem Abstand über die Oberfläche zu führen und diese damit abzutasten. Dabei erhält man Bilder der hier gezeigten Art.

3.5.5 Halbleiter

Bringt man unterschiedliche Materialien, z.B. unterschiedlich dotierte Halbleiter zusammen, so können die möglichen Zustände der Elektronen durch eine Potenzialbarriere getrennt sein. In solchen Strukturen können sich die Elektronen nicht mehr frei bewegen, sie leiten deshalb keinen Strom. Wird hingegen ein elektrisches Feld angelegt, so werden die Zustände verschoben. Bei einer geeigneten Feldstärke erzeugt man auf beiden Seiten der Barriere energetisch gleiche Zustände, und es kommt zu Tunnelprozessen.

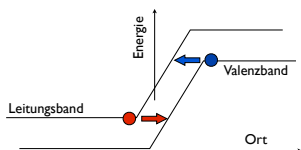


Abbildung 3.38: Strom-Spannungsverlauf einer Diode.

Bei dieser Spannung steigt der Strom, der durch die Diode fließt, stark an. Solche Elemente werden deshalb als Spannungsreferenz verwendet.

3.5.6 Josephson Effekt

Elektronen können auch im supraleitenden Zustand durch nichtleitende Bereiche tunneln. Dies wird als Josephson Effekt bezeichnet. Sogenannte Josephson-Schalter sollten für schnelle Computer verwendet werden. Dies hat sich aber aufgrund von technischen Problemen als unrealistisch erwiesen, sie werden aber heute wieder intensiv untersucht für den Einsatz in Quantencomputern. Außerdem wird der Effekt in der Metrologie verwendet, z.B. als Spannungsreferenz.

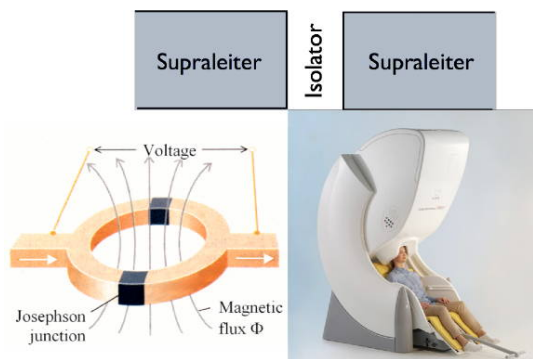


Abbildung 3.39: Grundlage des Josephson Effekts, Aufbau eines SQUIDs und Anwendung in der Medizin.

Die gegenwärtig wichtigste Anwendung des Josephson Effekts ist aber für die Messung von Magnetfeldern mit dem sog. SQUID, einer ringförmigen Anordnung von zwei Josephson-Kontakten. Dies wird z.B. in der Medizin für die Magnetoenzephalographie genutzt, der Messung von Hirnströmen.

3.5.7 Lokalisiertes Tunneln von Atomen

Da die Tunnelrate exponentiell von der bewegten Masse abhängt, tritt sie in erster Linie bei leichten Teilchen auf, also bei Elektronen und leichten Atomkernen, wie z.B. Wasserstoff. Im Gegensatz zu Elektronen sind Atome aber i.a. nicht frei beweglich, sondern lokalisiert, sie befinden sich in einem Potenzialminimum. Gerade Wasserstoff ist aber häufig nicht in einem einzelnen Minimum anzutreffen, sondern in einem Mehrfach-Minimum. Ein wichtiger Fall ist die Wasserstoff-Brücke.

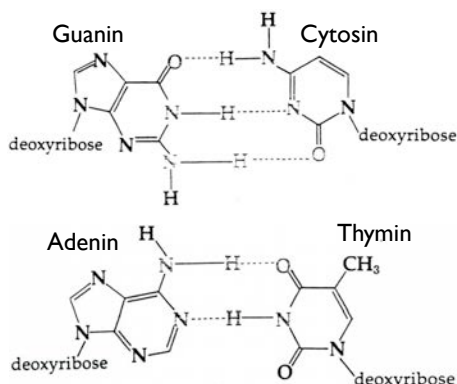


Abbildung 3.40: Basenpaare der DNA mit Wasserstoffbrücken.

In diesem Fall ist der Wasserstoff nicht an ein einzelnes anderes Atom gebunden, sondern er befindet sich zwischen zwei anderen Atomen, typischerweise Sauerstoff oder Stickstoff. Das vielleicht wichtigste Beispiel für eine Wasserstoff-Brücke ist das Molekül DNS, welches die Erbinformation speichert. Hier werden die beiden Stränge durch Wasserstoffbrücken zwischen zwei Paaren von Deoxyribose zusammengehalten.

Der Wasserstoff hat in solchen Anordnungen häufig nicht nur ein Potenzialminimum zur Verfügung, sondern mehrere, die räumlich und energetisch nicht allzu weit voneinander entfernt sind. Da die Wellenfunktion der Atome, genau wie bei Elektronen, nicht abrupt beim klassischen Wendepunkt endet, können die Wellenfunktionen aus benachbarten Potenzialminima überlappen. In diesem Falle kommt es zu Tunnelprozessen der Atome. Ein gut charakterisierter Fall ist derjenige des Ammoniaks (NH_3).

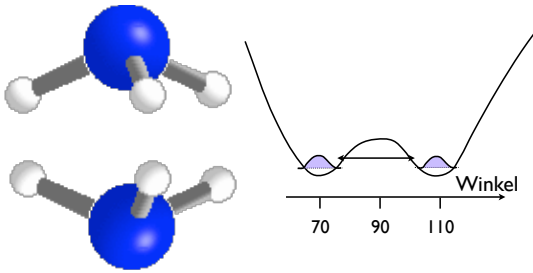


Abbildung 3.41: Links: Struktur von Ammoniak. Rechts: Potenzielle Energie als Funktion des Bindungswinkels.

Ammoniak besteht aus einem Stickstoffatom, an den drei Wasserstoffatome gebunden sind. Es besitzt klassisch gesehen einen energetisch günstigsten Zustand, der eine Pyramide darstellt. Das Spiegelbild dieser Struktur hätte natürlich die gleiche Energie. Wenn wir die Energie als Funktion der Öffnungswinkels HNH darstellen, so finden wir, dass sie ein Maximum erreicht, wenn das Molekül planar ist, und ein Minimum für einen Winkel von etwa 107.8° . Für das Molekül als Ganzes bildet die Konfiguration in der Nähe der planaren Struktur eine Potenzialbarriere, mit den beiden Minima, welche spiegelsymmetrischen Strukturen entsprechen. Wenn wir die beiden Strukturen mit der minimalen Energie als Ψ_l und Ψ_r bezeichnen, dann ist der Grundzustand die Linearkombination

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_l + \Psi_r).$$

Die antisymmetrische Linearkombination

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_l - \Psi_r)$$

hat eine etwas höhere Energie.

Ist das System zunächst in einem der Minima lokalisiert, so kann es durch den Energieberg hindurch tunneln. Dies geschieht mit einer Frequenz

$$\omega = \frac{\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0}{\hbar},$$

welche durch die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen Ψ_1 und Ψ_0 gegeben ist. Beim Ammoniak beträgt die Frequenz 23.87011 GHz. Diese

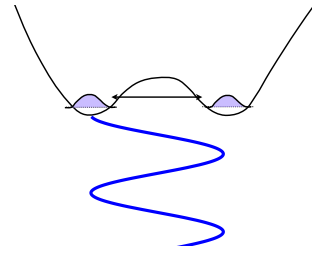


Abbildung 3.42: Tunnelprozesse in einem Doppelminimum-Potenzial.

Frequenz wurde z.B. für den Ammoniak-Maser benutzt, der eine Kurzzeitstabilität von besser als 10^{-10} erreichen kann.

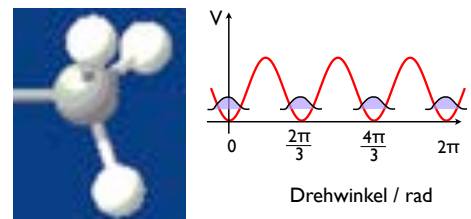


Abbildung 3.43: Links: Struktur einer Methylgruppe. Rechts: Potenzielle Energie als Funktion des Rotationswinkels.

Die Protonen von Methylgruppen befinden sich immer in benachbarten Potenzialminima. Da Protonen relativ leicht sind überlappen ihre Wellenfunktionen stark genug, dass es zu Tunnelprozessen kommt.

In der Glasphysik spielen die sogenannten Doppelminimum-Potenziale eine wichtige Rolle. Tunnelprozesse sollen hier für das Verhalten bei tiefen Temperaturen verantwortlich sein. Da es sich in diesem Fall um relativ schwere Teilchen handelt sind die Tunnelraten aber sehr viel kleiner.

Ähnliche Tunnelprozesse spielen auch in der Biologie eine wichtige Rolle. So sollen sie u.a. für einen Großteil der Mutationen verantwortlich sein.

3.5.8 Astrophysik und Kosmologie

Auch in der Kosmologie postuliert man Tunnelprozesse um zu erklären, weshalb das Universum so homogen und so flach ist. Eine Theorie geht davon aus, dass das Universum kurz nach dem "big bang" sich

in einem unterkühlten Zustand befunden hat (nach ca. 10^{-40} s, bei einer Temperatur von $\approx 10^{30}$ K), in einem lokalen Potenzialminimum. Das Universum als ganzes konnte dieses lokale Minimum aber verlassen, wobei es eine sogenannte inflationäre Phase durchlief, eine Ausdehnung auf das Vielfache seines vorherigen Durchmessers.

Da die meisten Kernprozesse Tunneleffekte sind, hat auch die Theorie der Sterne sehr viel mit Tunnelprozessen zu tun. Auch schwarze Löcher, die als Endstadium der vieler Sterne postuliert werden, müssten aber die Möglichkeit haben, über Tunnelprozesse Energie an die Umgebung abzustrahlen. Allerdings ist dies ein sehr spekulatives Thema, da eine genaue Behandlung erst im Rahmen einer quantenmechanischen Gravitationstheorie möglich sein wird, was vorläufig nicht möglich ist.

3.6 Der endliche Potenzialtopf

3.6.1 Gebundene Zustände

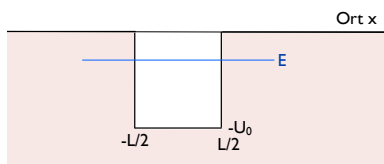


Abbildung 3.44: Potenzialverlauf beim endlichen Potenzialtopf.

Wir betrachten nun einen Potenzialtopf endlicher Tiefe, mit

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } -\infty < x < -L/2 \\ -U_0 & \text{für } -L/2 < x < L/2 \\ 0 & \text{für } -L/2 < x < \infty \end{cases} .$$

Wir betrachten nun ausschließlich gebundene Zustände, also Zustände mit $\mathcal{E} < 0$. Die Zustandsfunktion außerhalb des Potenzialtopfs muss dann exponentiell abfallen, mit der Rate

$$\kappa = \Im\{k_1\} = \frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} .$$

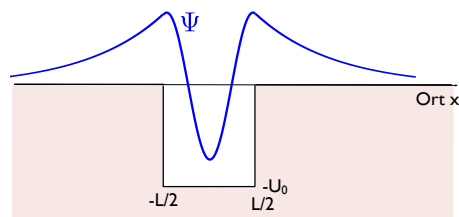


Abbildung 3.45: Zustandsfunktion $\Psi(x)$ im endlichen Potenzialtopf

Die Teillösungen für diesen Bereich sind somit

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= ae^{\kappa x} \text{ für } x < -\frac{L}{2} \\ \Psi_{III}(x) &= de^{-\kappa x} \text{ für } x > \frac{L}{2} . \end{aligned}$$

Im Bereich des Topfes ($-a < x < a$) muss der Wellenvektor reell sein:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} + U_0)}}{\hbar} .$$

Wir setzen die Wellenfunktion reell an:

$$\Psi_{II}(x) = b \cos(k_2 x) + c \sin(k_2 x) .$$

Wie üblich bestimmen wir die Koeffizienten aus den Stetigkeitsbedingungen. Aus der Stetigkeitsbedingungen für die Funktion erhalten wir

$$\begin{aligned} ae^{-\kappa L/2} &= b \cos(k_2 L/2) - c \sin(k_2 L/2) \\ de^{-\kappa L/2} &= b \cos(k_2 L/2) + c \sin(k_2 L/2) . \end{aligned}$$

Die Stetigkeitsbedingungen für die erste Ableitung liefern

$$\begin{aligned} \kappa a e^{-\kappa L/2} &= bk_2 \sin(k_2 L/2) \\ &\quad + ck_2 \cos(k_2 L/2) \\ -d \kappa e^{-\kappa L/2} &= -bk_2 \sin(k_2 L/2) \\ &\quad + ck_2 \cos(k_2 L/2) . \end{aligned}$$

Wir eliminieren die Koeffizienten a und d , indem wir die Gleichungen durcheinander dividieren:

$$\begin{aligned} \frac{\kappa}{k_2} &= \frac{b \sin(k_2 L/2) + c \cos(k_2 L/2)}{b \cos(k_2 L/2) - c \sin(k_2 L/2)} \\ \frac{\kappa}{k_2} &= \frac{b \sin(k_2 L/2) - c \cos(k_2 L/2)}{b \cos(k_2 L/2) + c \sin(k_2 L/2)} . \end{aligned}$$

Gleichsetzen der beiden Ausdrücke liefert

$$\begin{aligned} & (b \sin(k_2 L/2) + c \cos(k_2 L/2)) \\ & \cdot (b \cos(k_2 L/2) + c \sin(k_2 L/2)) \\ = & (b \sin(k_2 L/2) - c \cos(k_2 L/2)) \\ & \cdot (b \cos(k_2 L/2) - c \sin(k_2 L/2)). \end{aligned}$$

Ausmultiplizieren ergibt

$$bc = 0.$$

Einer der beiden Koeffizienten muss also verschwinden. Dies ist eine direkte Konsequenz der Symmetrie des Potentials: In einem symmetrischen Potential müssen die Lösungen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein. Wir betrachten die beiden Lösungsscharen getrennt.

3.6.2 Gerade Lösungen

Wir betrachten zunächst den Fall $c = 0$, d.h. Lösungen, die im Bereich der Potenzialmulde einen cos-förmigen Verlauf aufweisen. Da es sich um gebundene Lösungen handelt, erwarten wir, dass nur für diskrete Energien \mathcal{E} Lösungen existieren. Wir bestimmen diese aus der obigen Gleichung für κ/k_2 , indem wir $c = 0$ setzen:

$$\frac{\kappa}{k_2} = \frac{\sin\left(\frac{k_2 L}{2}\right)}{\cos\left(\frac{k_2 L}{2}\right)} = \tan\left(\frac{k_2 L}{2}\right). \quad (3.3)$$

Die weitere Behandlung wird vereinfacht, wenn wir dimensionslose Parameter einführen. Als ersten Parameter wählen wir

$$\lambda = L \frac{\sqrt{2mU_0}}{2\hbar}.$$

Dieser Parameter wächst mit der Tiefe und der Breite des Topfes. Als zweiten Parameter normieren wir die Energie \mathcal{E} des Teilchens auf die Tiefe des Topfes:

$$z = \frac{\mathcal{E}}{U_0} + 1$$

oder

$$\mathcal{E} = (z - 1)U_0,$$

d.h. z wächst linear von 0 am Boden des Potentialtopfs bis auf 1 am oberen Ende.

Damit wird

$$\frac{k_2 L}{2} = L \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} + U_0)}}{2\hbar} = L \frac{\sqrt{2mzU_0}}{2\hbar} = \lambda \sqrt{z}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\kappa}{k_2} &= \frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\sqrt{2m(\mathcal{E} + U_0)}} = \frac{\sqrt{(1-z)U_0}}{\sqrt{(z-1)U_0 + U_0}} \\ &= \sqrt{\frac{1-z}{z}}. \end{aligned}$$

Damit wird Gleichung (3.3) in dimensionsloser Form

$$\frac{\kappa}{k_2} = \sqrt{\frac{1-z}{z}} = \tan(\lambda \sqrt{z}). \quad (3.4)$$

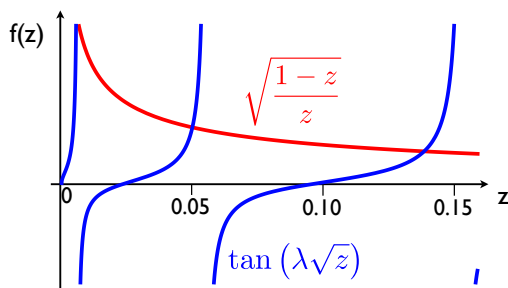


Abbildung 3.46: Die beiden Funktionen aus Gl. (3.4).

Dies ist eine transzendente Gleichung für z ; sie kann aber graphisch gelöst werden: Wir tragen beide Seiten gegen z auf, d.h. gegen die normierte Energie des Teilchens über dem Boden des Potentials. Je größer der Topf (d.h. je größer λ), desto stärker wird die z -Achse skaliert, d.h. desto tiefer sind die Lösungen und desto mehr Lösungen existieren. Für den Grundzustand wird dann die linke Seite der Gleichung groß, so dass die entsprechende Kurve den

tan weit oben schneidet. Das Argument des tan läuft dann gegen $\pi/2$. Somit liegt der Grundzustand bei

$$\lambda\sqrt{z} \approx \frac{\pi}{2},$$

so dass

$$z = \frac{\pi^2}{4\lambda^2} = \frac{\pi^2}{L^2 2mU_0/\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{8mL^2 U_0}.$$

Die Teilchenenergie wird damit

$$\mathcal{E} = (z-1)U_0 = -U_0 + \frac{\hbar^2}{8mL^2}.$$

Die Energie der einzelnen Zustände liegt somit um einen Betrag über dem Boden des Potentials, der unabhängig ist von U_0 . Dies ist in Übereinstimmung mit dem Resultat, das wir für den unendlich tiefen Potentialtopf erhalten hatten. Dies erscheint plausibel: Wenn der Topf genügend tief ist, spielt die genaue Tiefe keine Rolle mehr.

Aus dieser grafischen Darstellung kann relativ leicht die Anzahl der gebundenen geraden Lösungen erhalten werden: Die linke Seite der Gleichung deckt den gesamten positiven Halbraum ab. Der tan muss diese Kurve jedesmal schneiden, wenn das Argument von $n\pi$ zu $n\pi + \pi/2$ läuft. Somit existieren immer $\geq \lambda/\pi$ Lösungen, d.h. λ/π aufgerundet auf die nächste ganze Zahl.

Häufig wird diese Funktion nicht wie hier gegen die Energie, sondern gegen den Impuls, d.h. gegen k_2 gezeichnet. Dadurch werden die Pole des tan äquidistant.

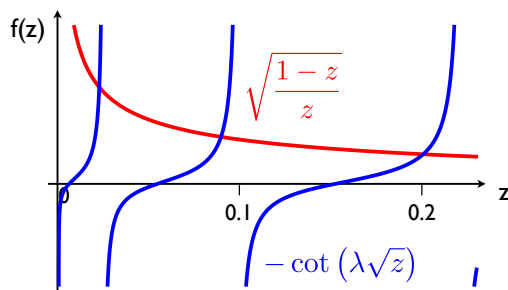


Abbildung 3.47: Die beiden Funktionen aus Gl. (3.5).

Auch diesmal erhalten wir eine transzendente Gleichung, die nur grafisch lösbar ist. Im Gegensatz zu den geraden Lösungen existiert hier nicht immer eine Lösung: ist $\lambda < \pi/2$, so schneiden sich die beiden Kurven im Bereich $z < 1$ nicht. Es ist auch klar, dass die niedrigste ungerade Lösung auf der Energieskala zwischen den beiden niedrigsten geraden Lösungen liegt.

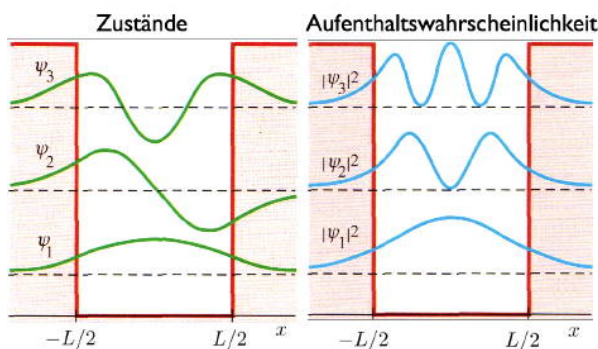


Abbildung 3.48: Übersicht über die Zustände und Wahrscheinlichkeitsdichten.

3.6.3 Ungerade Lösungen

In direkter Analogie zum Fall der geraden Lösungen setzen wir diesmal $b = 0$ und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\kappa}{k_2} &= \frac{-\cos\left(\frac{k_2 L}{2}\right)}{\sin\left(\frac{k_2 L}{2}\right)} = -\cot\left(\frac{k_2 L}{2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{1-z}{z}} = -\cot(\lambda\sqrt{z}). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Wir können damit die Lösungen zusammenfassen. Die Zustände sind qualitativ identisch mit denjenigen, die wir im unendlichen Potentialtopf kennengelernt hatten. Insbesondere wechseln sich auch gerade und ungerade Zustände ab, die Zahl der Knoten nimmt mit jedem Zustand um einen zu. Der wichtigste Unterschied ist, dass die Zustände hier erst im Potenzial auf Null abfallen, mit einer Eindringtiefe, die nach oben zunimmt.

3.6.4 Freie Zustände

Zum Schluss betrachten wir noch Zustände mit positiver Energie, $\mathcal{E} > 0$. Diese sind über die gesamte x -Achse delokalisiert und alle Energien sind erlaubt. Diese Zustände werden als freie Zustände oder als Streuzustände bezeichnet.

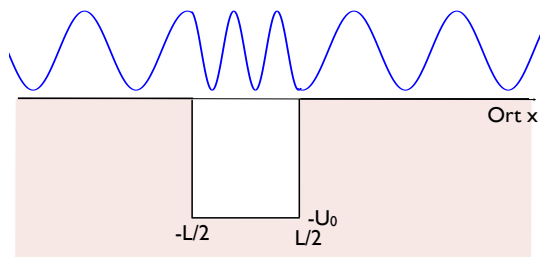


Abbildung 3.49: Lösung in den unterschiedlichen Bereichen.

Die Situation ist identisch zum Fall der Potenzialbarriere, d.h. das Verhältnis der Amplitude der einfallenden Welle zur Amplitude der transmittierten Welle ist

$$a = f e^{ik_1 L} \left[\cos(k_2 L) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} i \sin(k_2 L) \right].$$

Der einzige Unterschied ist, dass in diesem Fall

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} + U_0)}}{\hbar} > k_1 = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}$$

gilt. Für Energien, die nicht sehr hoch sind, erhalten wir Reflexion am Potenzialtopf, außer wenn die Resonanzbedingung

$$k_2 L = n\pi$$

erfüllt ist, d.h. wenn sich im Potenzialtopf stehende Wellen ausbilden. Man kann diesen Effekt so verstehen, dass zwischen den beiden reflektierten Wellen destruktive Interferenz auftritt, zwischen den transmittierten aber konstruktive Interferenz.

Wir können diese Bedingung auch ausdrücken als

$$2m(\mathcal{E} + U_0) = \left(\frac{n\hbar}{2L} \right)^2$$

oder

$$\mathcal{E} + U_0 = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}.$$

Für ein Elektron und $n = 1$ entspricht dies

$$\begin{aligned} \mathcal{E} + U_0 &= \left(\frac{6 \cdot 10^{-34}}{L} \right)^2 \frac{1}{8 \cdot 2 \cdot 10^{-30}} \\ &= \frac{2 \cdot 10^{-38}}{L^2} \text{ J} = \frac{2 \cdot 10^{-18}}{L[\text{Å}]^2} \text{ J} \\ &= \frac{12}{L[\text{Å}]^2} \text{ eV}. \end{aligned}$$

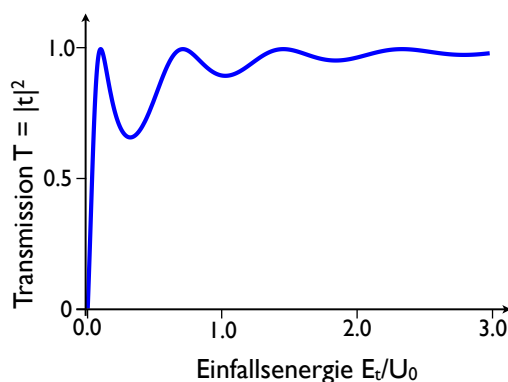


Abbildung 3.50: Transmissionswahrscheinlichkeit durch den endlichen Potenzialtopf.

In der Figur ist die Transmission als Funktion der normierten Teilchenenergie aufgetragen, für einen Potenzialtopf der Länge $L = 3 \text{ nm}$ und Tiefe $U_0 = 0.5 \text{ eV}$.

3.7 Der harmonische Oszillator

3.7.1 Hamiltonoperator

Das wichtigste Potenzial in der Physik ist das quadratische. Für fast alle Systeme kann die potenzielle Energie in der Nähe des Gleichgewichts durch eine Parabel angenähert werden: Wenn wir die Energie als Taylorreihe entwickeln, verschwindet die erste Ableitung aufgrund der Gleichgewichtsbedingung, während die höheren Terme für kleine Auslenkungen vernachlässigbar sind. Beim harmonischen

Oszillator wird nur dieser Beitrag zur potenziellen Energie berücksichtigt. Beispiele für harmonische Oszillatoren sind Schwingungen von Molekülen oder Festkörpern, aber auch Anregungen in elektromagnetischen Feldern.

Wir schreiben für die potenzielle Energie

$$U = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Der Hamiltonoperator eines Teilchens mit Masse m in einem quadratischen Potenzial enthält die kinetische und die potenzielle Energie,

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

und die zeitunabhängige Schrödingergleichung wird somit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \Psi(x) = \mathcal{E} \Psi(x)$$

oder

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = \left(\frac{m}{2} \omega^2 x^2 - \mathcal{E} \right) \Psi(x)$$

oder

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = \left(\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 - 2 \frac{m}{\hbar^2} \mathcal{E} \right) \Psi(x).$$

Eine Lösung für diese Gleichung ist die Gaußfunktion

$$\Psi(x) = e^{-\alpha x^2} \quad \text{mit } \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Zweimaliges Ableiten ergibt

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = e^{-\alpha x^2} (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha).$$

Somit stellt die Gaußfunktion eine Lösung dar für den Zustand mit der Energie

$$\frac{m}{\hbar^2} \mathcal{E} = \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad \rightarrow \quad \mathcal{E} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Dies ist der Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

3.7.2 Dimensionslose Operatoren

Die weitere Rechnung kann übersichtlicher gestaltet werden, wenn wir dimensionslose Orts- und Impulsoperatoren verwenden:

$$Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad P = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p.$$

In diesen Koordinaten sind Ort und Impuls

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} Q \quad p = \sqrt{m\hbar\omega} P$$

und der Hamiltonoperator wird zu

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2). \end{aligned}$$

Die Vertauschungsrelation zwischen P und Q ist

$$[Q, P] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} [x, p] = \frac{1}{\hbar} (i\hbar) = i1.$$

Außerdem führen wir die folgenden Linearkombinationen ein:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP).$$

Somit ist

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2} (Q - iP)(Q + iP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 - iPQ + iQP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 + i[Q, P]) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 - 1). \end{aligned}$$

Ebenso ist

$$\begin{aligned} aa^\dagger &= \frac{1}{2} (Q + iP)(Q - iP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 + iPQ - iQP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 - i[Q, P]) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + P^2 + 1). \end{aligned}$$

Somit gilt die Vertauschungsrelation

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1.$$

In diesen Operatoren ist der Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\hbar\omega}{2}(P^2 + Q^2) \\ &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

Hier haben wir den Zahloperator $N = a^\dagger a$ eingeführt. Offenbar lösen wir die Schrödingergleichung, wenn wir die Eigenwerte von N bestimmen. Diese Methode ist in vielen weiteren Bereichen nützlich. So werden diese Operatoren in der Quantenelektrodynamik (QED), in der Festkörperphysik oder in der Quantenstatistik verwendet.

Aus der Definition von N folgt

$$[N, a] = a^\dagger aa - aa^\dagger a = [a^\dagger, a]a = -a$$

und

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger.$$

3.7.3 Eigenwerte und Eigenvektoren

Wir schreiben die Eigenwerte und Eigenvektoren von N als

$$N|n\rangle = n|n\rangle.$$

Wir nehmen hier an, dass die Eigenvektoren normiert sind, so dass $\langle n|n\rangle > 0$. Außerdem ist

$$\langle n|N|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = |a|n\rangle|^2 \geq 0.$$

Somit müssen die Eigenwerte des Zahloperators nicht-negativ und damit die Eigenwerte des Hamiltonoperators positiv sein. Außerdem kann der Eigenwert genau dann verschwinden, wenn $a|n\rangle = 0$. Der niedrigste Eigenwert von N ist somit 0 und die Energie des Grundzustandes ist

$$\mathcal{E}_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Die höheren Eigenwerte erhalten wir aus der Vertauschungsrelation $[N, a] = -a$:

$$Na|n\rangle = (aN - a)|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle.$$

Offenbar erzeugt a aus dem Eigenzustand $|n\rangle$ einen anderen Eigenzustand von N mit Eigenwert $n - 1$. Da wir bereits den niedrigsten Zustand $|n = 0\rangle$ gefunden haben, muss es eine Reihe von Zuständen $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ geben, welche alle Eigenzustände des Zahloperators N sind. Diese werden durch a^\dagger erzeugt: Aus der Vertauschungsrelation

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger$$

folgt

$$Na^\dagger|n\rangle = a^\dagger n|n\rangle + a^\dagger|n\rangle = (n + 1)a^\dagger|n\rangle.$$

Somit ist $a^\dagger|n\rangle$ ein Eigenvektor von N mit Eigenwert $n + 1$. Die Eigenwerte von N sind die nicht-negativen ganzen Zahlen $0, 1, 2, \dots$ und die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$\mathcal{E}_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind somit äquidistant. Dies findet man auch experimentell, sofern das Potenzial wirklich harmonisch ist.

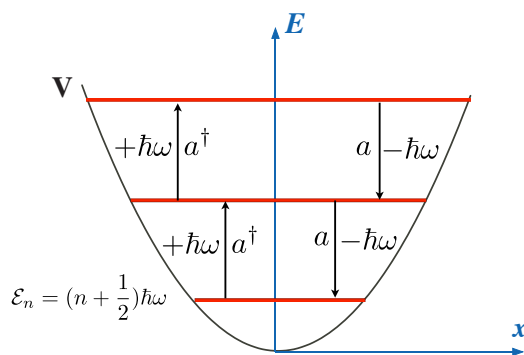


Abbildung 3.51: Eigenwerte des harmonischen Oszillators und Effekt der Operatoren a und a^\dagger .

3.7.4 Normierung und Matrixelemente

Wir bestimmen als nächstes die Normierung der Eigenzustände. Aus

$$\begin{aligned} |a^\dagger|n\rangle|^2 &= \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|1+a^\dagger a|n\rangle \\ &= (n+1)\langle n|n\rangle \end{aligned}$$

folgt

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

wobei wir die Phase willkürlich zu Null gesetzt haben. Somit erzeugt a^\dagger jeweils den nächst-höheren Zustand:

$$\begin{aligned} a^\dagger|0\rangle &= |1\rangle \\ a^\dagger|1\rangle &= \sqrt{2}|2\rangle & |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger|1\rangle \\ (a^\dagger)^n|0\rangle &= \sqrt{n!}|n\rangle & |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle. \end{aligned}$$

Er wird deshalb als Erzeugungs- oder Aufsteigeoperator bezeichnet. Die wiederholte Anwendung des Aufsteigeoperators auf den Grundzustand $|0\rangle$ liefert sämtliche Eigenzustände von N .

Der konjugierte Operator a liefert

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

die Quantenzahl n um 1 verringert und als Vernichtungs- oder Absteigeoperator bezeichnet wird.

Man spricht beim Grundzustand $|0\rangle$ auch vom Vakuumzustand, da er nur die minimale Energie enthält. Jede Anwendung des Aufsteigeoperators erzeugt daraus einen um ein Energiequant höher gelegenen Zustand, er erzeugt also eine zusätzliche Anregung, erhöht also die Energie des Systems. Die Anregungsquanten werden je nach Art des harmonischen Oszillators als Phononen oder Photonen bezeichnet. Der Absteigeoperator reduziert die Zahl der Anregungsquanten um eins und wird deshalb als Vernichtungsoperator bezeichnet.

3.7.5 Ortsdarstellung

Wir hatten bereits festgestellt, dass der Grundzustand durch eine Gaußfunktion dargestellt werden kann. Im Gegensatz zum klassischen harmonischen Oszillator ist die niedrigste mögliche Energie somit nicht Null, sondern $\hbar\omega/2$. Dies ist ein typisches quantenmechanisches Phänomen, welches direkt auf die Unschärferelation zurückgeführt werden kann: Das Potenzial beschränkt die räumliche Ausdehnung des Teilchens. Damit muss der Impuls eine gewisse Unschärfe erhalten. Sein Mittelwert verschwindet, aber der Mittelwert des Quadrates und damit die kinetische Energie erhalten einen endlichen Wert. Aufgrund der endlichen Ausdehnung im Raum ist auch die potenzielle Energie ungleich Null.

In der Ortsdarstellung ist der normierte Grundzustand

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$

Wir gehen zu dimensionslosen Koordinaten, indem wir

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

setzen. Mit dem korrekten Normierungsfaktor wird der Grundzustand dann

$$\Psi_0(y) = \pi^{-1/4} e^{-y^2/2}.$$

Der Normierungsfaktor ist so gewählt, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0|^2 dy = 1.$$

Der Aufsteigeoperator hat in der dimensionslosen Ortsdarstellung die Form

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Wir wenden ihn auf den Grundzustand an und erhalten

$$\begin{aligned}\Psi_1(y) &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{1}} \Psi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{1/4}} \left(y - \frac{\partial}{\partial y} \right) e^{-y^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{1/4}} \left(ye^{-y^2/2} + ye^{-y^2/2} \right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} ye^{-y^2/2}.\end{aligned}$$

Die nächste Iteration ergibt

$$\begin{aligned}\Psi_2(y) &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{2}} \Psi_1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{1/4}} \left(y - \frac{\partial}{\partial y} \right) ye^{-y^2/2} \\ &= \frac{e^{-y^2/2}}{\sqrt{2\pi}^{1/4}} (y^2 - 1 + y^2) \\ &= \frac{2y^2 - 1}{\sqrt{2\pi}^{1/4}} e^{-y^2/2}.\end{aligned}$$

Im Ortsraum ist der n -te Zustand gegeben durch die Hermite-Funktionen

$$\Psi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}.$$

Hier stellt $H_n(x)$ das n -te Hermite-Polynom dar. Es kann z.B. aus

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

berechnet werden. Die ersten 5 haben die Form

$$\begin{aligned}H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12\end{aligned}$$

Somit ist H_n ein Polynom vom Grade n . Für gerades n ist H_n gerade, für ungerades n ungerade. H_n hat n reelle Nullstellen.

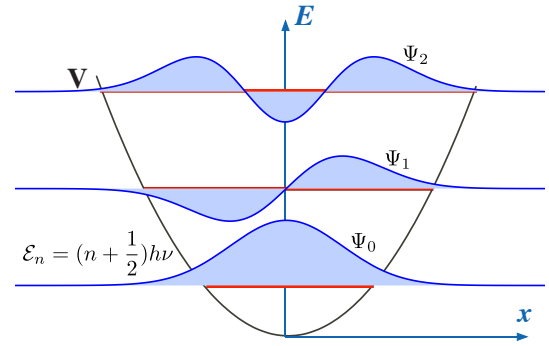


Abbildung 3.52: Zustände des harmonischen Oszillators im Ortsraum.

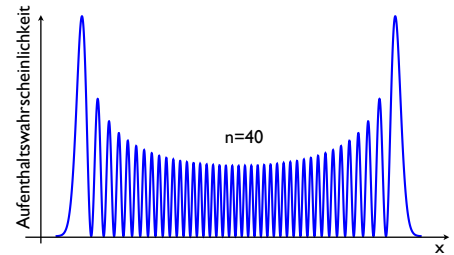


Abbildung 3.53: Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $n=40$.

Abb. 3.52 zeigt eine grafische Darstellung der Lösungsfunktionen. Wie wir schon bei klassischen Wellengleichungen oder beim Potenzialopf gefunden hatten, hat der niedrigste Zustand keinen Knoten, der zweite hat einen Knoten, der nächste 2 etc.

Der Grenzfall $n \rightarrow \infty$ wird oft als "klassischer Grenzfall" bezeichnet. Hier nähert sich z.B. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit dem klassischen Wert an: die Maxima findet man in der Nähe der klassischen Umkehrpunkte.

In dimensionsbehafteten Größen lauten die Lösungsfunktionen

$$\Psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$