

2.9 Die Schrödinger-Gleichung (Fortsetzung)

Anwendungsbeispiele (bisher)

a) Unendlich hoher Potenzialtopf

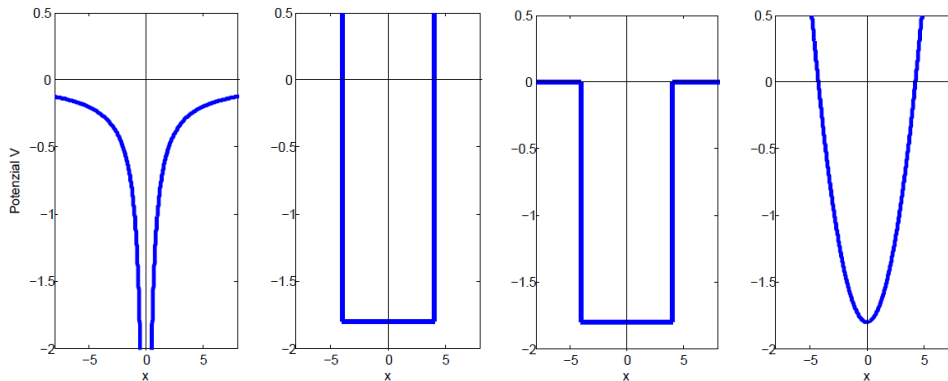
gebundene Zustände, deren Energieeigenwerte mit n^2 ansteigen ($n = 1, 2, 3, \dots$)

b) Endlich hoher Potenzialtopf

gebundene Zustände ähnlich dem unendlich hohen Potenzialtopf, aber

- Wellenfunktion dringt in die Wände ein
- über dem Rand des Topfes sind die Zustände ungebunden mit kontinuierlicher Energie

Anmerkung zu "Potenzialtöpfen":



Das Nullniveau des Potentials kann willkürlich gewählt werden

Die Kraft auf ein Teilchen im Potenzial ist durch die Ableitung des Potentials gegeben

Energie = potenzielle Energie + kinetische Energie (am Rand es Potenzialtopfs null)

1/r-Potenzial: Gravitation oder elektrostatische Anziehung (Bohrsches Atommodell), Kraft $\sim 1/r^2$

Unendlich hoher Kasten: Idealisierung beliebig hoher Energie, Wellenfunktionen am Rand unstetig

Endlich hoher Kasten: Gutes Modell für Atomkern, Kraft im Inneren 0, kurzreichweitige Kraft am Rand

Parabel: harmonischer Oszillator, gutes Modell für viele Fälle, Kraft \sim Abstand (Hookesches Gesetz)

c) Der harmonische Oszillator

Sehr wichtiges Beispiel, weil jede rücktreibende Kraft bei einer Auslenkung (z.B. eines Atoms im Molekül) in erster Näherung linear ist (erstes Glied einer Taylor-Reihe).

$$F = C \cdot x \quad \omega = \sqrt{C/m} \quad V(x) = \frac{C}{2} x^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{C}{2} x^2 \cdot \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Variablentransformation, um die Gleichung zu vereinfachen

$$a = x \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \quad b = \frac{2E}{\hbar \cdot \omega}$$

$$\psi''(a) - a^2 \cdot \psi(a) + b \cdot \psi(a) = 0$$

Einfachste Lösung (durch Probieren): Gauß-Funktion

$$\psi_0 = A \cdot e^{-\frac{1}{2}a^2} \quad \text{mit} \quad b=1 \quad \text{und} \quad E_0 = \frac{\hbar \cdot \omega}{2}$$

Allgemeiner Ansatz führt zur sogenannten **Hermiteschen Differenzialgleichung**

$$\psi_0 = H(a) \cdot e^{-\frac{1}{2}a^2} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2 H}{\partial a^2} - 2a \cdot \frac{\partial H}{\partial a} + (b-1) \cdot H = 0$$

Die Lösungen heißen **Hermitesche Polynome** $H_v(a)$ vom Grade v . Beispiele:

$$H_0(a) = 1 \quad H_1(a) = 2a \quad H_2(a) = 4a^2 - 2 \quad H_3(a) = 8a^3 - 12a$$

Interessant sind die Eigenwerte der Energie (vgl. schwarzer Körper):

$$E_n = (n + 1/2) \cdot \hbar \cdot \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Charles Hermite
(1822 - 1901)

Alternative "Herleitung"

Kann der Hamilton-Operator der Schrödinger-Gleichung der Form $\frac{1}{2m} \{p^2 + m^2 \omega^2 x^2\} \psi = E \cdot \psi$

faktorisiert werden? Etwa so: $u^2 + v^2 = (iu + v) \cdot (-iu + v) = u^2 + iuv - ivu + v^2$

Das geht schief, weil sich Orts- und Impulsoperator nicht vertauschen lassen. Definiere Operatoren:

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp ip + m\omega x) \quad \text{Dann ist} \quad a_- a_+ \equiv \frac{1}{2m\hbar\omega} (p^2 + m^2 \omega^2 x^2) - \frac{i}{2\hbar} [x, p] = \frac{H}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}$$

$$a_+ a_- \equiv \frac{1}{2m\hbar\omega} (p^2 + m^2 \omega^2 x^2) - \frac{i}{2\hbar} [p, x] = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

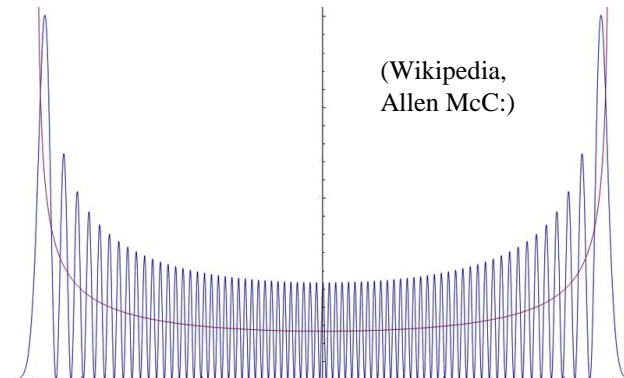
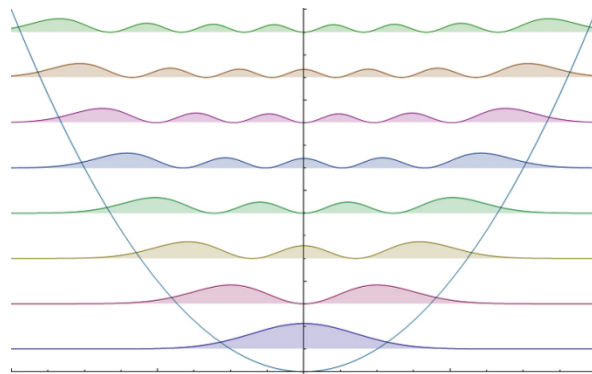
Keine Faktorisierung, aber diese Operatoren haben trotzdem nützliche Eigenschaften (ohne Beweis):

$$H(a_+ \psi_n) = (E + \hbar\omega)(a_+ \psi_n) \quad a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}$$

$$H(a_- \psi_n) = (E - \hbar\omega)(a_- \psi_n) \quad a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad a_- \psi_0 = 0$$

Hieraus kann zunächst ψ_0 und daraus alle anderen Wellenfunktionen durch Anwendung von a_+ generiert werden. Mit dem Hamilton-Operator auf $a_{\pm} \psi_n$ angewandt erhält man den nächst höheren oder niedrigeren E -Eigenwert.

Aufsteige- bzw. Absteige-Operator a_{\pm} (sog. Leiteroperatoren)



Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** für die ersten sieben Zustände des harmonischen Oszillators (oben) und für den Zustand mit $n = 70$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist an den Umkehrpunkten erhöht, um so mehr, je höher n ist, was dem klassischen harmonischen Oszillator entspricht.

d) Potenzialstufe

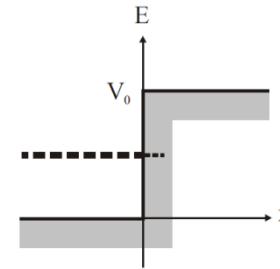
I) $V(x) = 0$ für $x < 0$

II) $V(x) = V_0 > 0$ für $x \geq 0$

Allgemeiner Ansatz

I) $\psi_I(x) = A \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}$

II) $\psi_{II}(x) = C \cdot e^{-\alpha \cdot x} + D \cdot e^{\alpha \cdot x}$


Schrödinger-Gleichung in Gebiet II ergibt:

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot \psi_{II} = \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \alpha^2 \cdot \psi_{II} = 0 \quad \text{mit} \quad \alpha \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)}$$

Je nach Vorzeichen von α oszilliert die Wellenfunktion oder sie klingt exponentiell ab.

Bei $x = 0$ muss die Wellenfunktion stetig und differenzierbar sein. Daher gilt:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \rightarrow \quad A + B = C \quad D = 0$$

$$\frac{\partial \psi_I(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}(0)}{\partial x} \quad \rightarrow \quad i \cdot k \cdot (A - B) = -\alpha C$$

Die Welle darf in Gebiet II nicht exponentiell anwachsen (α reell) oder nach links laufen (α imaginär)

$$ik(A - B) = -\alpha(A + B)$$

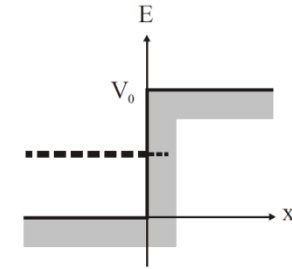
$$A(ik + \alpha) = B(ik - \alpha) \quad \rightarrow \quad B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} A$$

$$C = A + \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} A \quad \rightarrow \quad C = \frac{2ik}{ik - \alpha} A$$

2 Fälle:

(i) $V_0 > E$ (Energie unter der Potenzialstufe) $\rightarrow \alpha$ reell

Im Gegensatz zum Verhalten eines klassischen Teilchens klingt die Welle in Gebiet II exponentiell ab. Die Eindringtiefe ist $1/\alpha$.

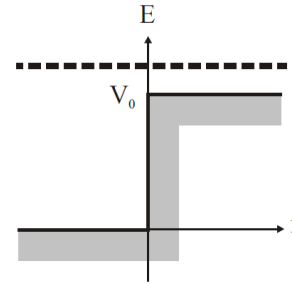


(ii) $E > V_0$ (Energie über der Potenzialstufe) $\rightarrow \alpha$ imaginär

Die Welle in Gebiet II oszilliert, aber mit anderer Wellenzahl. Ein Teil der Welle wird reflektiert.

$$\psi_{II}(x) = C \cdot e^{ik'x} \quad \text{mit} \quad k' \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (E - V_0)}$$

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} A \quad \text{und} \quad C = \frac{2k}{k + k'} A$$



Reflexionswahrscheinlichkeit

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2$$

Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = \frac{v'_{ph}}{v_{ph}} \cdot \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{k'}{k} \cdot \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k \cdot k'}{(k + k')^2}$$

Korrektur für die verschiedenen Phasengeschwindigkeiten:

$$v_{ph} = \frac{\hbar k}{2m} \quad v'_{ph} = \frac{\hbar k'}{2m}$$

Man sieht

$$R + T = 1$$

Vergleich mit der Optik:

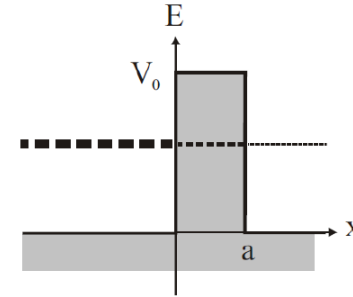
Transmission und Reflexion an der Grenzfläche zwischen Gebieten mit Brechungsindex n_1 und n_2 :

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2}$$

$$T = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}$$

e) Potenzialbarriere - Der Tunneleffekt

I) $V(x) = 0$ für $x < 0$ $\psi_I(x) = A \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}$
 II) $V(x) = V_0$ für $0 \leq x \leq a$ $\psi_{II}(x) = A \cdot e^{\alpha \cdot x} + B \cdot e^{-\alpha \cdot x}$
 III) $V(x) = 0$ für $x > a$ $\psi_{III}(x) = E \cdot e^{i \cdot k \cdot x}$



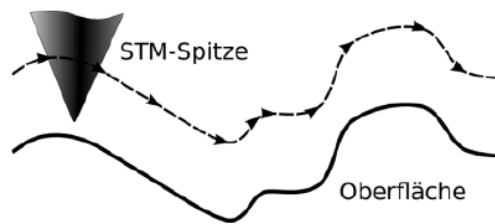
Wellenfunktionen müssen an den Grenzen stetig und differenzierbar sein

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \frac{\partial \psi_I(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}(0)}{\partial x}$$

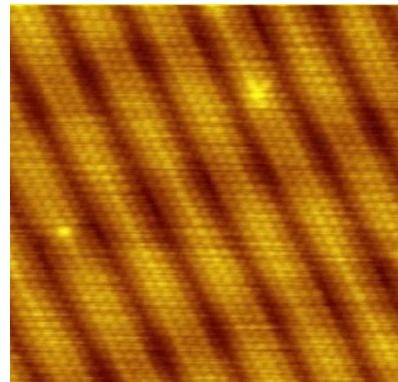
$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \quad \frac{\partial \psi_{II}(a)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{III}(a)}{\partial x}$$

Resultat wie vorher: die Welle wird in der Barriere (Bereich II) exponentiell gedämpft und setzt sich nach der Barriere als oszillierende Well fort. Die Transmissionswahrscheinlichkeit sinkt exponentiell mit a:

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} \propto e^{-2\alpha \cdot a} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)}$$



Die Spitze kann sich entweder in konstanter Höhe befinden (Variation des Tunnelstroms) oder - wie hier gezeigt - bei konstantem Tunnelstrom der Oberfläche folgen (Variation der Höhenregelung).



Oberfläche eines Gold-Einkristalls

Anwendungen, Beispiele

- Rastertunnelmikroskop (RTM, STM), "tunneln" von Elektronen zwischen einer Oberfläche und einer spitzen Sonde.
- Erzeugung hoher Harmonischer von Laserpulsen
- Erklärung des radioaktiven α -Zerfalls des Atomkerns