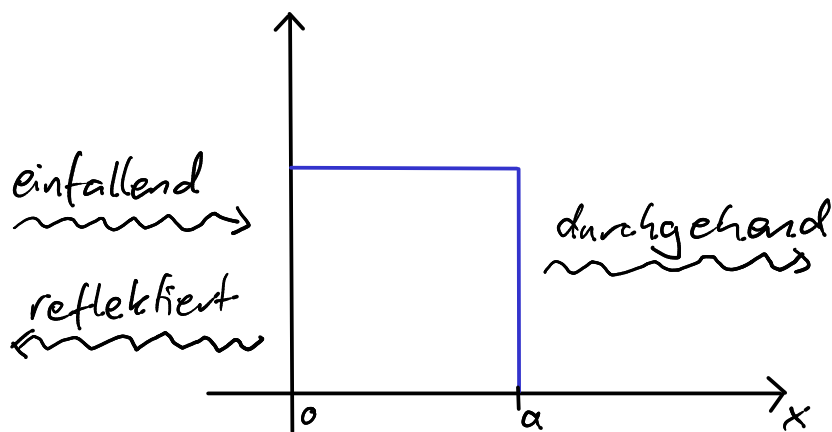


Potential barriere



$$0 < E < V_0$$

Ansatz: $\psi_I(x) = e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$

↑
einfallende
Amplitude 1 gewählt

← reflektierte Welle

$$\psi_{II}(x) = A_{II} e^{-\kappa x} + B_{II} e^{\kappa x}$$

$$\psi_{III}(x) = A_{III} e^{ikx}$$

← durchgehende Welle

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

Wir betrachten hier ebene Wellen, die nicht normierbar sind. Eigentlich müsste man Wellenpakete konstruieren aber ebene Wellen geben korrekt die Haupteffekte wieder und sind viel leichter zu rechnen.

Anschlussbedingungen:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) : \quad 1 + B_I = A_{II} + B_{II}$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) : \quad ik + ikB_I = -\kappa A_{II} + \kappa B_{II}$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) : \quad A_{II} e^{-\kappa a} + B_{II} e^{-\kappa a} = A_{III} e^{ika}$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) : \quad -\kappa A_{II} e^{-\kappa a} + \kappa B_{II} e^{\kappa a} = ik A_{III} e^{ika}$$

nach einiger Rechnung:

$$A_{III} = \frac{4ik\kappa e^{-ika}}{(k+i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k-i\kappa)^2 e^{-\kappa a}}$$

↑

Amplitude der durchgehenden Welle.

Man kann k und damit E frei und kontinuierlich wählen
(Im Gegensatz zu den diskreten Energien der gebundenen Zustände)

$$\kappa a \gg 1$$

$$T = |A_{III}|^2 = \frac{16k^2\kappa^2 e^{-2\kappa a}}{(k^2 + \kappa^2)} \quad \text{Transmissionskoeffizient}$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen hinter der Barriere zu finden ist größer als Null! (klassisch verboten!)

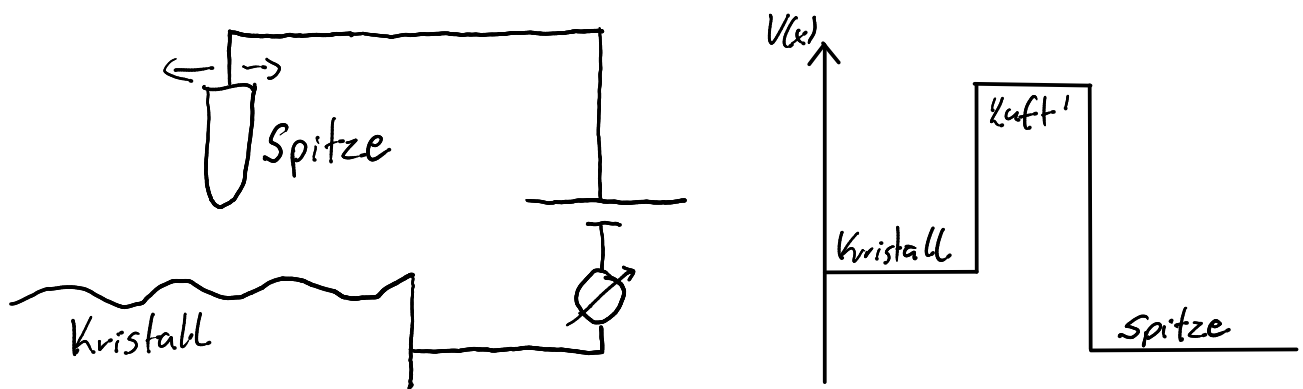
Dieses ist ein typischer quantenmechanischer Effekt der Tunneleffekt. Die exponentielle Form ist typisch.

Was passiert für

- a) die Breite $a \rightarrow \infty$
- b) sehr hohe Barriere $(V_0 - E) \rightarrow \infty$
- c) den klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0, m \rightarrow \infty$

Die Transmission geht gegen Null

Anwendung des Tunneleffekts: das Tunnelmikroskop



Man kann z.B. die Struktur einer Oberfläche bestimmen. Elektronen tunneln von der Oberfläche in die Spitze.

Die starke Variation $T \propto e^{-2\kappa a}$ führt zu einer hohen Auflösung der Ordnung von 0,01 nm.

Man kann einzelne Atome untersuchen.

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\stackrel{\text{Schrödinger gl.}}{=} \psi^*(\vec{r}, t) \left[-\frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \right) \right]$$

$$+ \psi(\vec{r}, t) \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi^*(\vec{r}, t) \right)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t) \right)$$

Kontinuitätsgleichung des Stromes einer Flüssigkeit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

Wir führen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}(\vec{r}, t)$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right)$$

mit dieser Definition gilt die Kontinuitätsgleichung wieder.

Am Beispiel der Potentialbarriere:

einfallende Welle $e^{ikx} \rightarrow j_i = \frac{1}{m} \operatorname{Re}(\psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi)$

$$= \frac{\hbar}{m} k$$

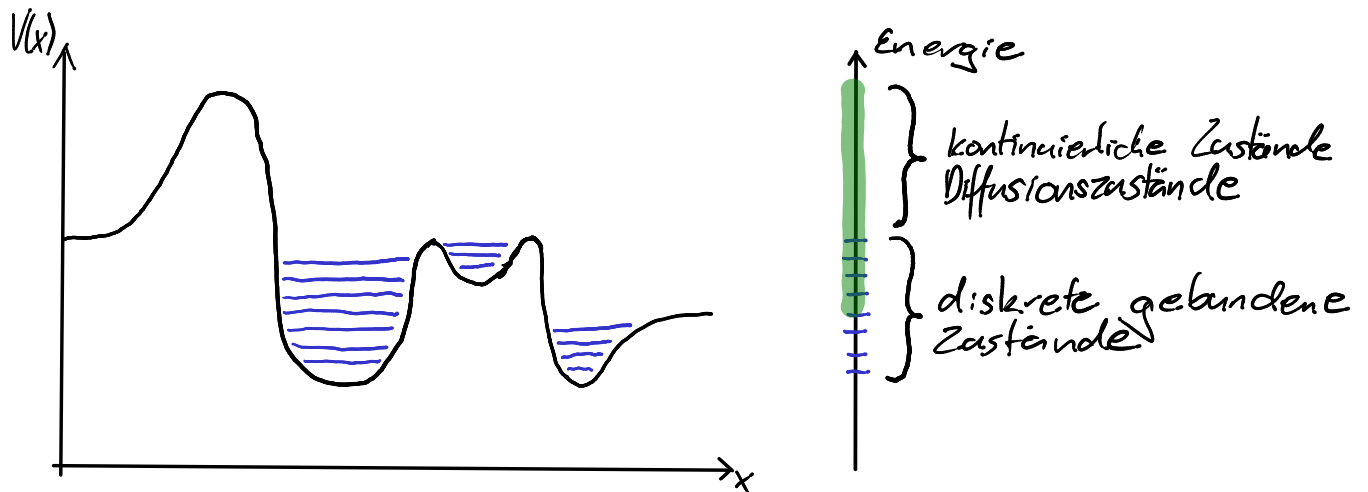
reflektierte Welle $B_{\text{I}} e^{-ikx} \rightarrow j_r = - \frac{\hbar k}{m} |B_{\text{I}}|^2$

transmittierte Welle $A_{\text{III}} e^{ikx} \rightarrow j_t = \frac{\hbar k}{m} |A_{\text{III}}|^2$

Der Strom ist erhalten: $j_i = |j_r| + j_t$

Reflexionskoeffizient: $R = \frac{|j_r|}{j_i}$

Transmissionskoeffizient: $T = \frac{j_t}{j_i} = |A_{\text{III}}|^2$



Höhere Dimensionen

Häufig ist das Potential separabel, d.h.

$$V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

stationäre Schrödingergleichung $\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x)\right) \psi(\vec{r}) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y)\right) \psi(\vec{r}) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)\right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Ansatz: $\psi(\vec{r}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

wenn gilt: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \psi_i(x_i) = (E_i - V(x_i)) \psi_i(x_i)$

dann ist $\psi(\vec{r})$ eine Lösung der Schrödingergleichung

mit $E = E_x + E_y + E_z$

IV Die Theorie der Quantenmechanik

Basdevant, Dalibard chapt. 5

Cohen-Tannoudji chapt. 2

Die Wellenmechanik wurde bekannt mit Arbeiten von Schrödinger (~ 1926). Vorher (Anfang 1925) hatte Heisenberg (Göttingen) eine abstrakte Theorie entwickelt. Born (Göttingen) hatte erkannt, dass die Regeln auf Matrizen basierte. 'Mechanik der Matrizen'. Basis der Quantenmechanik.

- 1926/27 konnten Schrödinger und Dirac die Äquivalenz der Wellen- und Matrizenmechanik zeigen.

Die Mathematischen Grundlagen wurden von Hilbert und von Neumann (~ 1927) entwickelt.