

Doppelmuldenpotential

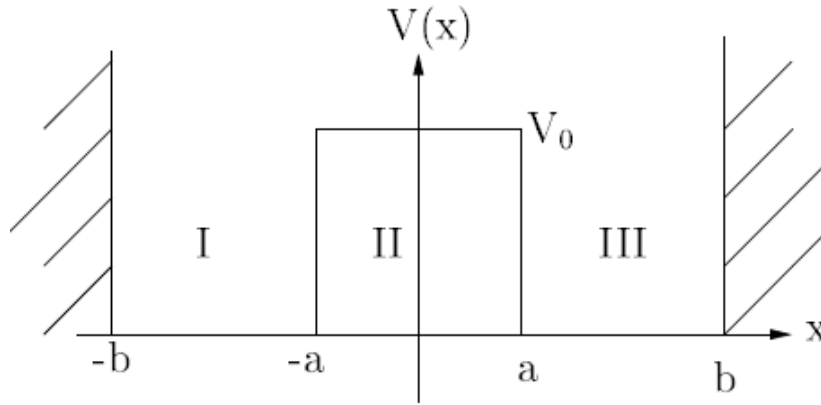


Figure 1: Doppelmuldenpotential

Beim Doppelmuldenpotential interessiert uns vorwiegend ein Teilchen welches eine Energie kleiner als der mittlere Potentialkasten hat. Wie man später aus der Rechnung ersieht, gibt es zwei mögliche Lösungen (positive/negative Parität) für das Problem. Da Superposition der beiden Lösungen wieder eine ergibt, stellt man fest, dass nach Summieren der beiden Lösungen die Wellenfunktion vollständig nur im Bereich I existiert. Zieht man dagegen die beiden Lösungen voneinander ab, so ist die Welle nur in Bereich III vorzufinden. Dieses Verhalten wird als **tunneln** des Teilchens interpretiert.

Wir werden die superpositionierte Lösung auch zeitentwickeln und eine **Tunnelzeit** feststellen. Ein Beispiel für dieses Phänomen ist das Ammoniakmolekül. Hierbei tunnelt das Stickstoffatom durch die Ebene dreier Wasserstoffatome. Seine Schwingungsfrequenz beträgt (laut wiki) 23,786 GHz.

Allgemeiner Ansatz

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \quad (1)$$

$$\psi_{II} = Ce^{qx} + De^{-qx} \quad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V - E)} \quad (2)$$

$$\psi_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{mit (siehe } \psi_I) k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \quad (3)$$

Die Randbedingung besagt, dass die Wellenfunktion am Rand des unendlichen Potentials verschwindet. Das kann man für eine Konkretisierung von Teilbereich I und III ausnutzen:

$$\begin{aligned} \psi_I(-b) = 0 &= Ae^{-ikb} + Be^{ikb} \\ \Leftrightarrow A &= -Be^{2ikb} \quad \text{A in 1 einsetzen} \\ \psi_I(x) &= -Be^{2ikb}e^{ikx} + Be^{-ikx} \\ &= -B(e^{2ikb}e^{ikx} - e^{-ikx}) \\ &= -Be^{ikb}(e^{ikb}e^{ikx} - e^{-ikb}e^{-ikx}) \\ &= \underbrace{-Be^{ikb}2i}_{\alpha} \sin(k(x+b)) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Rightarrow \psi_I(x) = \alpha \sin(k(x+b)) \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
\psi_{III}(b) &= 0 = Fe^{ikb} + Ge^{-ikb} \\
&\Leftrightarrow G = -Fe^{2ikb} \quad \text{G in 3 einsetzen} \\
\psi_{III}(x) &= Fe^{ikx} - Fe^{2ikb}e^{-ikx} \\
&= -F(e^{2ikb}e^{-ikx} - e^{ikx}) \\
&= -Fe^{ikb}(e^{ikb}e^{-ikx} - e^{-ikb}e^{ikx}) \\
&= \underbrace{-Fe^{ikb}}_{\beta} \sin(k(-x+b)) \\
&= \beta \sin(k(-x+b))
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\Rightarrow \psi_{III}(x) = \beta \sin(k(b-x)) \tag{7}$$

Für den mittleren Bereich II gilt es die Anschlussbedingungen zu anderen Bereichen zu untersuchen. Anschluss von I an II

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \rightarrow \alpha \sin(k(b-a)) = Ce^{-qa} + De^{qa} \tag{8}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_I(-a) = \frac{d}{dx}\psi_{II}(-a) \rightarrow k\alpha \cos(k(b-a)) = qCe^{-qa} - qDe^{qa} \tag{9}$$

und Anschluss von II an III

$$\psi_{III}(a) = \psi_{II}(a) \rightarrow \beta \sin(k(b-a)) = Ce^{qa} + De^{-qa} \tag{10}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{III}(a) = \frac{d}{dx}\psi_{II}(a) \rightarrow -k\beta \cos(k(b-a)) = qCe^{qa} - qDe^{-qa} \tag{11}$$

NR um zu der Beziehung zwischen den Konstanten C und D gelangen: (8) – (10)

$$\begin{aligned}
(\alpha - \beta) \sin(k(b-a)) &= Ce^{-qa} + De^{qa} - Ce^{qa} - De^{-qa} \\
&= C(e^{-qa} - e^{qa}) + D(e^{qa} - e^{-qa}) \\
&= -2C \sinh(qa) + 2D \sinh(qa) \\
&= 2(D - C) \sinh(qa)
\end{aligned} \tag{12}$$

$$\Rightarrow (\alpha - \beta) \sin(k(b-a)) = -2(C - D) \sinh(qa) \tag{13}$$

(9) + (11)

$$\begin{aligned}
k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a)) &= qCe^{-qa} - qDe^{qa} + qCe^{qa} - qDe^{-qa} \\
&= q(C(e^{-qa} + e^{qa}) - D(e^{qa} + e^{-qa})) \\
&= 2q(C \cosh(qa) - D \cosh(qa)) \\
&= 2q(C - D) \cosh(qa)
\end{aligned} \tag{14}$$

$$\Rightarrow k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a)) = 2q(C - D) \cosh(qa) \tag{15}$$

$\frac{(15)}{(13)}$

$$\begin{aligned}
\frac{k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a))}{(\alpha - \beta) \sin(k(b-a))} &= \frac{2q(C - D) \cosh(qa)}{-2(C - D) \sinh(qa)} \\
\frac{k \cos(k(b-a))}{\sin(k(b-a))} &= \frac{-q \cosh(qa)}{\sinh(qa)} \\
k \cot(k(b-a)) &= -q \coth(qa)
\end{aligned} \tag{16}$$

(8) + (10)

$$\begin{aligned}
(\alpha + \beta) \sin(k(b-a)) &= Ce^{-qa} + De^{qa} + Ce^{qa} + De^{-qa} \\
&= C(e^{-qa} + e^{qa}) + D(e^{qa} + e^{-qa}) \\
&= -2C \cosh(qa) + 2D \cosh(qa) \\
&= 2(C + D) \cosh(qa)
\end{aligned} \tag{17}$$

$$\Rightarrow (\alpha + \beta) \sin(k(b-a)) = 2(C + D) \cosh(qa) \tag{18}$$

(9) - (11)

$$\begin{aligned}
k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a)) &= qCe^{-qa} - qDe^{qa} - qCe^{qa} + qDe^{-qa} \\
&= q(C(e^{-qa} - e^{qa}) - D(e^{qa} - e^{-qa})) \\
&= -2q(C \sinh(qa) - D \sinh(qa)) \\
&= -2q(C + D) \sinh(qa)
\end{aligned} \tag{19}$$

$$\Rightarrow k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a)) = -2q(C + D) \sinh(qa) \tag{20}$$

$\frac{(20)}{(18)}$

$$\begin{aligned}
\frac{k(\alpha - \beta) \cos(k(b-a))}{(\alpha - \beta) \sin(k(b-a))} &= \frac{-2q(C + D) \sinh(qa)}{2(C + D) \cosh(qa)} \\
\frac{k \cos(k(b-a))}{\sin(k(b-a))} &= \frac{-q \sinh(qa)}{\cosh(qa)} \\
k \cot(k(b-a)) &= -q \tanh(qa)
\end{aligned} \tag{21}$$

Für gerade Parität ergibt sich: $\frac{(9)}{(8)}$

$$\frac{k\alpha \cos(k(b-a))}{\alpha \sin(k(b-a))} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{22}$$

$$\underbrace{k \cot(k(b-a))}_{(21)} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{23}$$

$$\cancel{q} \tanh(qa) = \cancel{q} \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{24}$$

$$\frac{\sinh(qa)}{\cosh(qa)} = \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{25}$$

Durch den Vergleich der rechten mit der linken Seite der Gleichung (25) steht jeweils im Nenner und Zähler die Definition von sinh bzw. cosh aber nur für den Fall wenn die Konstanten $C = D$ jeweils gleich sind.

$$\Rightarrow C = D$$

Eins der Konstanten in (8) und (10) einsetzen und die Division daraus $\frac{(8)}{(10)}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha \sin(k(b-a))}{\beta \sin(k(b-a))} &= \frac{Ce^{-qa} + Ce^{qa}}{Ce^{qa} + Ce^{-qa}} \\
\frac{\alpha}{\beta} &= 1
\end{aligned} \tag{26}$$

$$\Rightarrow \alpha = \beta \tag{27}$$

Für die ungerade Parität wird in den Zusammenhang $\frac{(9)}{(8)}$ die Gleichung (16) eingesetzt:

$$\frac{k\alpha \cos(k(b-a))}{\alpha \sin(k(b-a))} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \quad (28)$$

$$\underbrace{k \cot(k(b-a))}_{(16)} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \quad (29)$$

$$\cancel{q} \coth(qa) = \cancel{q} \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \quad (30)$$

$$\frac{\cosh(qa)}{\sinh(qa)} = \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \quad (31)$$

Hier sieht man wieder durch Vergleich dass die Gleichung nur für $C = -D$ erfüllt ist. Daraus ergeben sich α und β ⁽⁸⁾₍₁₀₎ :

$$\begin{aligned} \frac{\alpha \sin(k(b-a))}{\beta \sin(k(b-a))} &= \frac{Ce^{-qa} - Ce^{qa}}{Ce^{qa} - Ce^{-qa}} \\ \frac{\alpha \sin(k(b-a))}{\beta \sin(k(b-a))} &= -C \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{e^{qa} - e^{-qa}} \\ \frac{\alpha}{\beta} &= -1 \end{aligned} \quad (32)$$

$$\Rightarrow \alpha = -\beta \quad (33)$$

1.0.1 Zusammenfassung der Zwischenlösung

Für die gerade Parität gilt für $\alpha = \beta$ und $C = D$ mit der transzendentalen Gleichung (21):

$$\boxed{k \cot(k(b-a)) = -q \tanh(qa)} \quad (34)$$

Somit gilt für die Wellengleichung:

$$\psi_I = \alpha \sin(k(x+b)) \quad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} E} \quad (35)$$

$$\psi_{II} = C \cosh(qx) \quad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} (V-E)} \quad (36)$$

$$\psi_{III} = \alpha \sin(k(b-x)) \quad (37)$$

Für die ungerade Parität gilt für $\alpha = -\beta$ und $C = -D$ mit der transzendentalen Gleichung (16):

$$\boxed{k \cot(k(b-a)) = -q \coth(qa)} \quad (38)$$

somit gilt für die Wellengleichung:

$$\psi_I = \alpha \sin(k(x+b)) \quad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} E} \quad (39)$$

$$\psi_{II} = C \sinh(qx) \quad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} (V-E)} \quad (40)$$

$$\psi_{III} = -\alpha \sin(k(b-x)) \quad (41)$$

1.1 Näherung für kleine Energien

Für kleine Energien (d.h. $E \ll V_0$ und $k \ll q$ und möglichst breite Barriere (d.h. $qa \gg 1$) kann man folgende Näherung aufstellen:

$$\begin{aligned}
\tanh(qa) &= \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{e^{qa} + e^{-qa}} \quad | \cdot \frac{e^{-qa}}{e^{-qa}} \\
&= \frac{1 - e^{-2qa}}{1 + e^{-2qa}} \quad | \cdot \frac{1 - e^{-2qa}}{1 - e^{-2qa}} \\
&= \frac{(1 - e^{-2qa})^2}{1^2 + e^{-4qa}} \\
&= \frac{1 - 2e^{-2qa} + e^{-4qa}}{1^2 + e^{-4qa}}
\end{aligned} \tag{42}$$

Für große $qa \gg 1$ kann der Term e^{-4qa} vernachlässigt werden. Für den Tangens Hyperbolicus ergibt sich:

$$\tanh(qa) \approx 1 - 2e^{-2qa} \tag{43}$$

und analog für den Cosinus Hyperbolicus:

$$\cosh(qa) \approx 1 + 2e^{-2qa} \tag{44}$$

Die Transzendenten Gleichungen (34) und (35) werden dann zu:

$$\cot(k(b-a)) = -\frac{q}{k} \tanh(qa) = -\frac{q}{k} \coth(qa) \tag{45}$$

Es ist geschickter mit dem Kehrwert der Gleichung (45) weiterzumachen:

$$\tan(k(b-a)) = -\frac{k}{q} \coth(qa) = -\frac{k}{q} \tanh(qa) \tag{46}$$

Nun können die Approximationen (43) und (44) eingesetzt werden:

$$\tan(k(b-a)) \approx -\frac{k}{q}(1 + 2e^{-2qa}) \approx -\frac{k}{q}(1 - 2e^{-2qa}) \tag{47}$$

Zusammengefasst lässt sich diese Gleichung (47) schreiben

$$\tan(k(b-a)) \approx -\frac{k}{q} \mp \frac{k}{q} 2e^{-2qa} \tag{48}$$

Wobei $-$ für die gerade Parität und $+$ für ungerade Parität steht. Im Falle von einer unendlich hohen Barriere gibt es keine Tunnelung und man erhält zwei separate Teilchenpotentiale. Das ist wenn $\frac{k}{q} \rightarrow 0$ oder q sehr groß wird. Aus der Gleichung (48) sieht man leicht, dass:

$$\tan(k^{(0)}(b-a)) \approx 0 \tag{49}$$

Die Einschränkung (49) bedeutet für den Argument des Tangens, dass es gleich ist einem ganzzahligen vielfachen von π also:

$$k^{(0)}(b-a) \approx n\pi \quad n \in \mathbb{N}_0 \tag{50}$$

In diesen Fällen kann die Barriere nicht durchtunnelt werden und man erhält das schon bekannte Energiespektrum von einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. D.h in unseren Fall haben wir zwei Potentialtöpfe ohne WW. Betrachte dies als Störungstherm 0-Ordnung:

$$E^{(0)} \approx \frac{\hbar^2 (k^{(0)})^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(b-a)^2} n^2 \tag{51}$$

Nun wollen wir eine sehr hohe aber nicht unendliche Potentialbarriere betrachten. Dies würde den Störungsterm 1-Ordnung entsprechen. Dazu stellen wir die Gleichung (48) nach dem Argument des Tangens um:

$$k(b-a) \approx \arctan \left(-\frac{k}{q} \mp \frac{k}{q} 2e^{-2qa} \right) \tag{52}$$

Als nächstes entwickeln wir den Arkustanges nach sehr kleinen $\frac{k}{q}$. Die allgemeine von Arkustangens lautet:

$$\arctan(x) = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots \approx x \quad (53)$$

Eingesetzt in die Gleichung (52):

$$k^{(1)}(b-a) \approx -\frac{k}{q} \mp \frac{k}{q} 2e^{-2qa} \quad (54)$$

Nach k umgestellt:

$$\begin{aligned} k^{(1)} &= -\frac{k}{q(b-a)} \mp \frac{k}{q(b-a)} 2e^{-2qa} \\ &= \frac{k}{q(b-a)} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \end{aligned} \quad (55)$$

Das Gesamte k_n ergibt sich aus der Summe von $k^{(0)}$ und $k^{(1)}$:

$$k_n = k^{(0)} + k^{(1)} = \frac{n\pi}{(b-a)} + \frac{k}{q(b-a)} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \quad (56)$$

Als Nebenrechnung wird k_n^2 berechnet:

$$\begin{aligned} k_n^2 &= \left(\frac{n\pi}{(b-a)} + \frac{k}{q(b-a)} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \right)^2 \\ &= \frac{n^2\pi^2}{(b-a)^2} + 2 \frac{n\pi}{(b-a)} \frac{k}{q(b-a)} (-1 \mp 2e^{-2qa}) + \underbrace{\frac{k^2}{q^2(b-a)^2} (-1 \mp 2e^{-2qa})^2}_{\approx 0 \text{ wegen } \frac{k^2}{q^2} \text{ zu vernachlässigen}} \end{aligned} \quad (57)$$

Mit der Näherung $k \approx k^{(0)}$ folgt:

$$k_n^2 = \frac{n^2\pi^2}{(b-a)^2} + 2 \frac{\pi^2 n^2}{q(b-a)^3} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \quad (58)$$

Dies eingesetzt in die Energie-Eigenwerte:

$$\begin{aligned} E_{n,\mp} &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m(b-a)^2} + 2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{q(b-a)^3} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \\ &= E^{(0)} \left[1 + \frac{2}{q(b-a)} (-1 \mp 2e^{-2qa}) \right] \\ &= E^{(0)} \left[1 - \frac{2}{q(b-a)} \mp \frac{4}{q(b-a)} e^{-2qa} \right] \end{aligned} \quad (59)$$

Dadurch dass die Potentialbarriere endlich ist, kann das Teilchen zwischen den beiden Potentialtöpfen hin und her tunneln. Dadurch ergeben sich folgende Korrekturen im Vergleich zu $E^{(0)}$:

- Durch das Tunneln hat das Teilchen mehr Raum zur Verfügung. Dadurch kommt es zu einer Energieniveau Absenkung. Dies wird durch den negativen Term $-\frac{2}{q(b-a)}$ deutlich.
- Durch den letzten Term $\mp \frac{4}{q(b-a)} e^{-2qa}$ kommt es zu einer Energieniveau-Aufspaltung. Diese zwei Niveaus sind sehr nah bei einander, wegen dem exponentiellen Ausdruck.

1.2 Tunneleffekt und Tunnelaufspaltung

Betrachte die gesamte Funktion für gerade und ungerade Parität ((35),(39)):

$$\psi_+(x) = \begin{cases} I & \alpha \sin(k(x+b)) \\ II & C \cosh(qx) \\ III & \alpha \sin(k(b-x)) \end{cases} \quad (60)$$

$$\psi_-(x) = \begin{cases} I & \alpha \sin(k(x+b)) \\ II & C \sinh(qx) \\ III & -\alpha \sin(k(b-x)) \end{cases} \quad (61)$$

Wobei ψ_+ für gerade und ψ_- für ungerade Parität steht. Möchte man nun, dass das Teilchen sich entweder im linken oder rechten Potentialtopf lokalisiert ist, nutzt man die Linearität der beiden Lösungen aus, sodass links oder rechts die Welle sich gegenseitig auslöscht. Das funktioniert für links mit der Addition und für rechts mit Subtraktion, vergleiche dazu (60) und (61):

$$\phi_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-) \quad \phi_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - \psi_-) \quad (62)$$

Uns interessiert nun die Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion, sei das Teilchen zum Zeitpunkt $t = 0$ in der linken Hälfte positioniert:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-) \quad (63)$$

Die Anwendung eines unitären Operators $U = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ auf die Wellenfunktion (63) macht sie zeitabhängig:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \psi(x, t = 0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_+ e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} + \psi_- e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \left(\psi_+ + \psi_- e^{-\frac{i}{\hbar}(E_- - E_+)t} \right) \end{aligned} \quad (64)$$

Die Oszillation der ungeraden Permutätsfunktion ψ_- unterscheidet sich von der geraden Funktion ψ_+ und man kann die Zeit Angeben nach der aus ϕ_L eine ϕ_R wird (vergleiche (62)). Dazu muss der Exponent gleich -1 werden. Das ist war für $e^{-i\pi} = -1$, also folgt für die Tunnelzeit τ :

$$\tau = \frac{\pi \hbar}{E_+ - E_-} \quad (65)$$

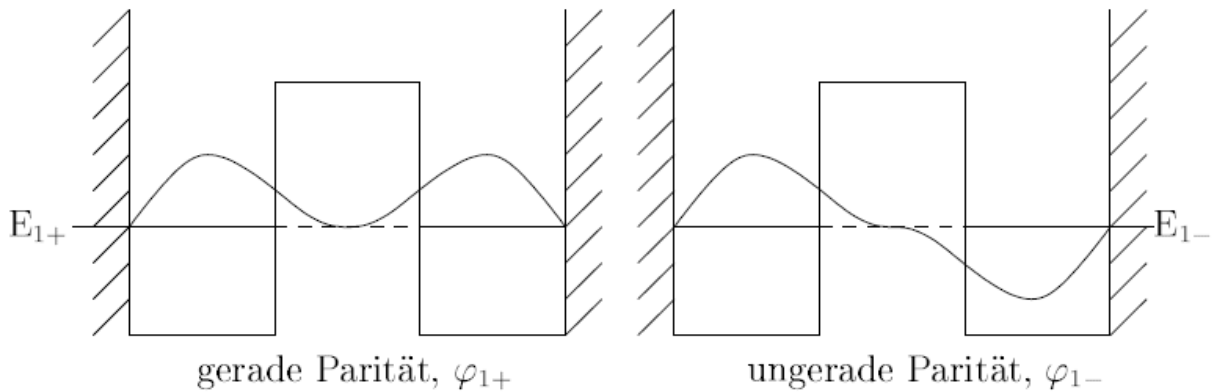


Figure 2: Symmetrische und Antisymmetrische Funktion.

Insgesamt tunnelt das Teilchen mit der Periode 2τ hin und her, d.h die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x, t)|^2$ ergibt immer den gleichen Wert für eine zeitliche Verschiebung von 2τ .

1.2.1 Referenzen

- http://www.condmat.uni-oldenburg.de/Skripte/html/qm1_skript_hyper.pdf