8.11 Zusammenfassung: Postulate der Quantenmechanik

1. Postulat: Der **quantenmechanische Zustand** eines abgeschlossenen Systems lässt sich vollständig durch eine normierte, komplexe Wellenfunktion ψ beschreiben.

2. Postulat: Die **Dynamik** eines abgeschlossenen quantenmechanischen Systems wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

beschrieben, wobei H der Hamilton-Operator des Systems ist.

3. Postulat: In der Quantenmechanik werden **Messungen** durch Operatoren M beschrieben, die auf die Wellenfunktionen ψ wirken. Der Mittelwert (Erwartungswert) einer Messgrösse für ein quantenmechanisches System im Zustand ψ ist gegeben durch

$$\langle M \rangle = \int \psi^* M \psi \, dx \, .$$

Die möglichen Ergebnisse einzelner Messungen der zum Operator M gehörenden Messgrösse sind die Eigenwerte m_n des Operators mit den Quantenzahlen n und den zugehörigen Eigenfunktionen ψ_n

$$M \psi_n = m_n \psi_n \, .$$

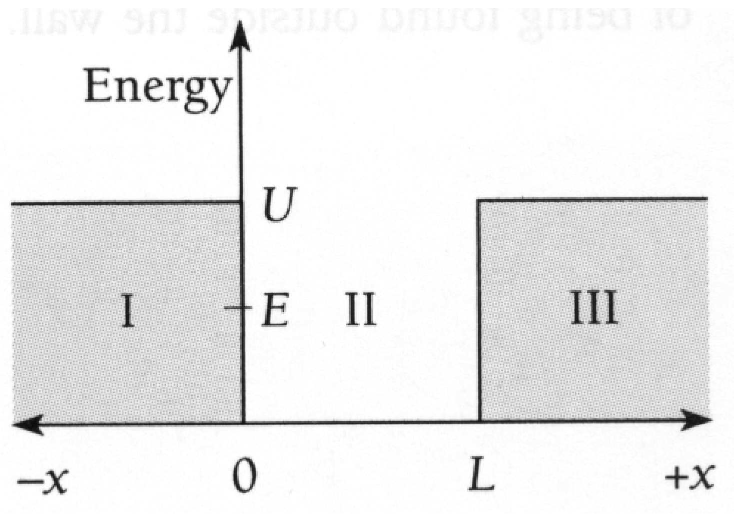
4. Postulat: Der quantenmechanische Zustand ψ eines **aus *n* Teilsystemen bestehenden Gesamtsystems** wird durch ein Tensor-Produkt der Wellenfunktionen ψ_i der Teilsysteme beschrieben.

$$\psi = \psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \psi_3 \otimes \dots \otimes \psi_n$$

siehe auch: Kapitel 9, Haken & Wolf; Kapitel 5, Beiser; Kapitel 2, Nielsen & Chuang

9. Eindimensionale (1D) quantenmechanische Probleme

9.1 Potentialtopf mit endlich hohen Wänden:



- alle realen Potentialtöpfe haben endlich hohe Wände
- 1D Potentialtopf mit $U = 0$ für $0 < x < L$ und $U = U_0 < \infty$ an allen anderen Orten
- betrachte ein gebundenes Teilchen mit Energie $E < U_0$ niedriger als die Tiefe des Potentialtopfs
- zugehörige Schrödinger-Gleichung

Drei Bereiche des Problems:

- Bereich II: $U = 0$
- Bereich I und III: $U_0 > E$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + U_0\psi = E\psi$$

$$\Leftrightarrow \quad \left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{(E-U_0)}_{<0}\right]\psi = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi = 0$$

Lösungen:

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

$$\psi = e^{ikx}$$

allgemeine Lösung:

- in Bereich I und III:

$$\psi_{I} = C e^{ax} + \cancel{D e^{-ax}} \qquad -\infty < x < 0$$

$$\psi_{III} = \cancel{F e^{ax}} + G e^{-ax} \qquad L < x < \infty$$

D = *F* = *0*: sonst Divergenz von ψ

- in Bereich II:

$$\psi_{II} = A \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + B \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$$

- mit Randbedingungen

$$\psi_{II}(x=0) = \psi_{I}(x=0) = C \qquad \text{stetige Wellenfunktion } \psi$$

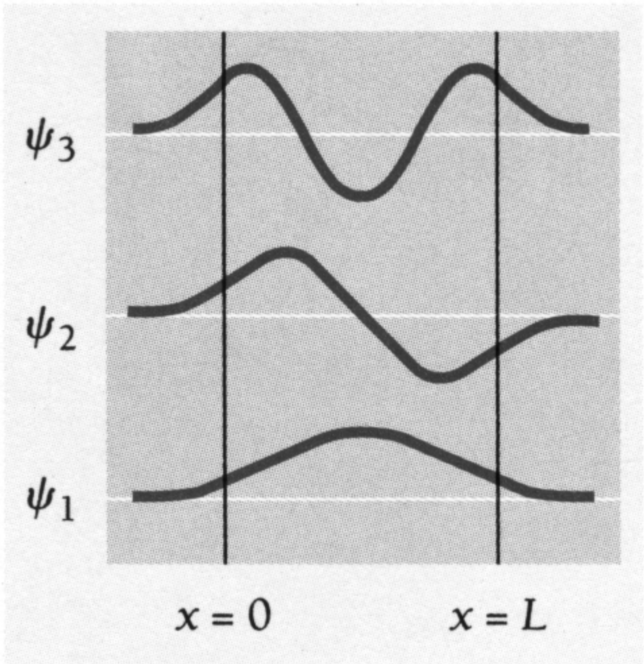
$$\psi_{II}(x=L) = \psi_{III}(x=L)$$

$$\frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(x=0) = \frac{\partial \psi_{I}}{\partial x}(x=0) \qquad \text{stetiger Impuls } (\sim \psi')$$

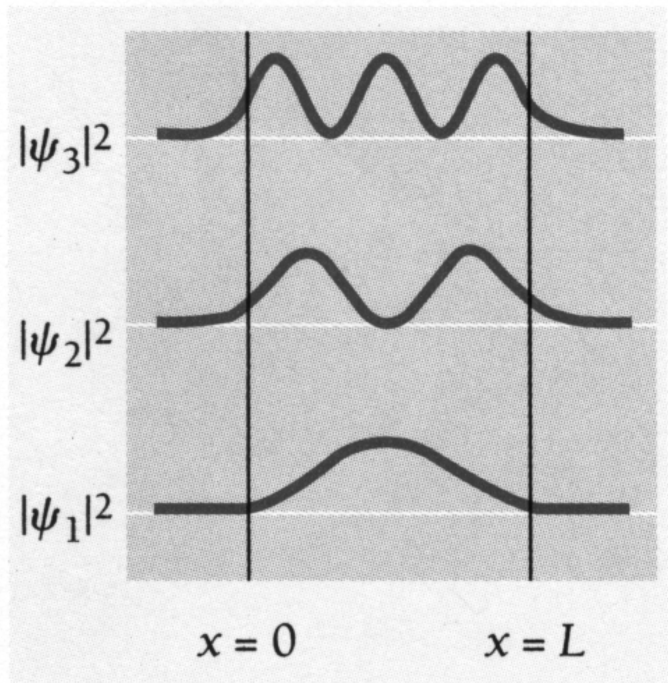
$$\frac{\partial \psi_{III}}{\partial x}(x=L) = \frac{\partial \psi_{I}}{\partial x}(x=L)$$

Wellenfunktionen eines Teilchens in einem endlichen Potentialtopf

Wellenfunktionen ψ:



Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi|^2$:



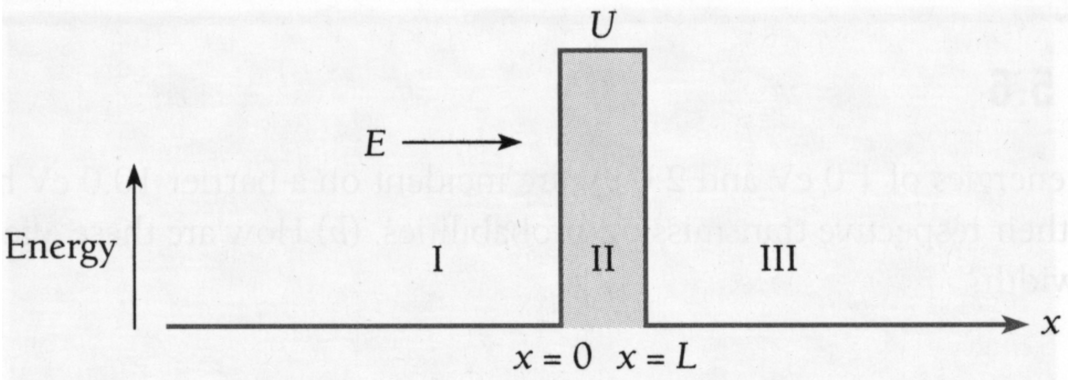
- das Teilchen dringt in die Wand des Potentialtopfs ein
- Teilchen dauerhaft gebunden für $E < U_0$

Fragen:
- Wie erzeugt man einen Potentialtopf?
- Wie lädt man ein einzelnes Teilchen in einen Potentialtopf?
- Wie verlässt das Teilchen den Potentialtopf?

physikalische Beispiele für Teilchen im Potentialtopf:
- Quantenpunkte

9.2 Der Tunnel-Effekt

- ein Teilchen mit kinetischer Energie E trifft auf eine Potentialbarriere mit Höhe $U_0 > E$ und Breite L



- nach den Regeln der klassischen Physik kann das Teilchen die Barriere nicht überwinden

- quantenmechanisch kann das Teilchen die Barriere durchdringen und sich auf der anderen Seite der Barriere weiter fortbewegen

- dieser quantenmechanische Effekt wird **Tunneln** genannt

Beispiele:

- Erzeugung von α-Teilchen in radioaktiven Zerfällen:
  Ein α-Teilchen tunnelt durch die Barriere des Bindungspotentials

- Tunnelkontakte, Tunneldioden:
  Elektronen tunneln zwischen zwei Metall-Elektroden durch eine isolierende Barriere

- Tunnel-Effekte in komplexen Systemen:
  Ein durch eine effektive Koordinate beschriebenes Objekt tunnelt durch eine Potential-Barriere

9.2.1 Näherungslösung

- die Transmissionswahrscheinlichkeit *T*, dass ein von links (Bereich I) einfallendes Teilchen durch die Barriere (Bereich II) tunnelt und sich weiter nach rechts (Bereich III) ausbreitet, ist gegeben durch

$$T = e^{-2 k_{II} L} \quad \text{mit} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

- *T* hängt von der Barrierenbreite *L*, dem Unterschied zwischen der kinetischen Energie des Teilchens und der Barrierenhöhe $(U_0\text{-}E)^{1/2}$ und der Masse des Teilchens $m^{1/2}$ ab

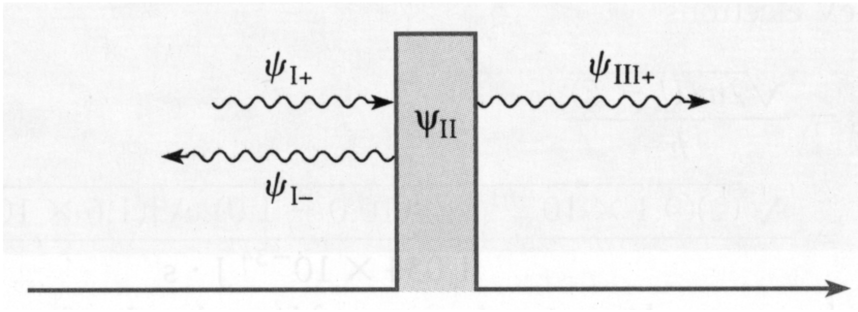
Beispiel:

- ein Elektron mit kinetischer Energie $E = 1\ eV$ tunnelt durch eine Barriere der Höhe $U_0 = 10\ eV$ und Breite $L = 0.5\ nm.$ Wie gross ist die Transmissionswahrscheinlichkeit *T*?

$$T = 1.1\ 10^{-7}$$

- selbst für leichte Teilchen und niedrige Barrieren ist *T* klein
- der Tunneleffekt kann experimentell beobachtet werden und wird z.B. in elektronischen Bauelementen angewandt

9.2.2 Berechnung der Tunnelrate *T*



- Schrödinger-Gleichung außerhalb der Barriere (Bereiche I und III)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I + E\psi_I = 0$$

identisch für ψ_{III}

- Lösungen

$$\psi_I = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_{III} = F e^{ik_1 x} + G e^{-ik_1 x} \quad \text{mit} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- einfallende Welle $\psi_{I+} = A e^{ik_1 x}$
- reflektierte Welle $\psi_{I-} = B e^{-ik_1 x}$
- transmittierte Welle $\psi_{III+} = F e^{ik_1 x}$

- Fluss *S* der mit Gruppengeschwindigkeit v_{I+} einfallenden Teilchen

$$S = |\psi_{I+}|^2 \, v_{I+}$$

- Transmissionswahrscheinlichkeit *T* ist das Verhältnis des einfallenden zum transmittierten Teilchenfluss

$$T = \frac{|\psi_{III+}|^2 \, v_{III+}}{|\psi_{I+}|^2 \, v_{I+}} = \frac{F F^*}{A A^*} \, \frac{v_{III+}}{v_{I+}}$$

Schrödinger-Gleichung im Bereich der Barriere:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{II} + (U-E)\psi_{II} = 0$$

- Lösung für $U > E$

$$\psi_{II} = C e^{-k_{II} x} + D e^{k_{II} x} \quad \text{mit } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

  - exponentiell ansteigende oder abfallende Wellenfunktion ψ_{II} (keine Oszillationen)
  - ψ_{II} ist keine Lösung eines freien Teilchens
  - dennoch verschwindet die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_{II}|^2$ in der Barriere nicht

Randbedingungen:

- am linken Rand der Barriere ($x = 0$)

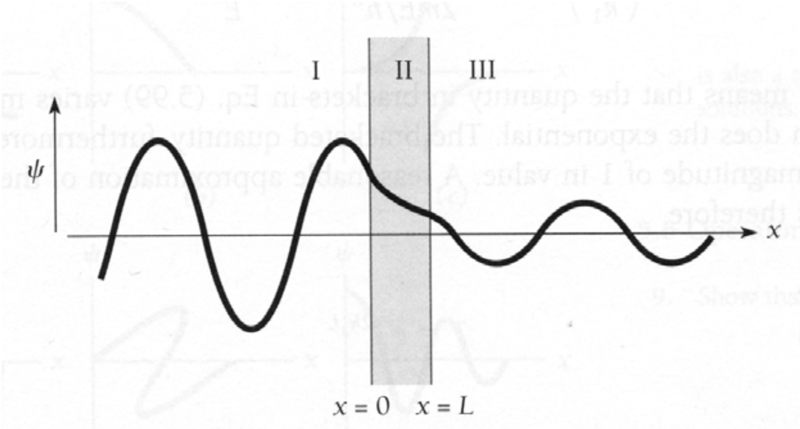
$$\psi_{I} = \psi_{II} \quad ; \quad \frac{\partial \psi_{I}}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}$$

- am rechten Rand der Barriere ($x = L$)

$$\psi_{II} = \psi_{III} \quad ; \quad \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x}$$

- Löse 4 Gleichungen für die vier Koeffizienten und drücke sie relative zu A aus ($|A|^2$ ist proportional zum einfallenden Teilchenfluss)

- graphische Darstellung der Lösung



Bestimme *A/F* aus den Randbedingungen

$$\frac{A}{F} = \left[\frac{1}{2} + \frac{i}{4}\left(\frac{k_{II}}{k_1} - \frac{k_1}{k_{II}}\right)\right] e^{(ik_1 + k_{II})L} + \left[\frac{1}{2} - \frac{i}{4}\left(\frac{k_{II}}{k_1} - \frac{k_1}{k_{II}}\right)\right] e^{(ik_1 - k_{II})L}$$

Vereinfachungen:

- betrachte im Verhältnis zur kinetischen Teilchen-Energie E hohe Potentialbarriere U

$$\frac{k_{II}}{k_1} > \frac{k_1}{k_{II}} \Rightarrow \frac{k_{II}}{k_1} - \frac{k_1}{k_{II}} \approx \frac{k_{II}}{k_1}$$

- betrachte breite Barriere ($k_{II} L > 1$)

$$e^{k_{II} L} \gg e^{-k_{II} L}$$

Daher:

$$\frac{A}{F} \approx \left(\frac{1}{2} + \frac{i k_{II}}{4 k_1}\right) e^{(ik_1 + k_{II})L}$$

Transmissions-Koeffizient:

$$T = \frac{AA^*}{FF^*} \frac{v_{III+}}{v_{I+}}$$

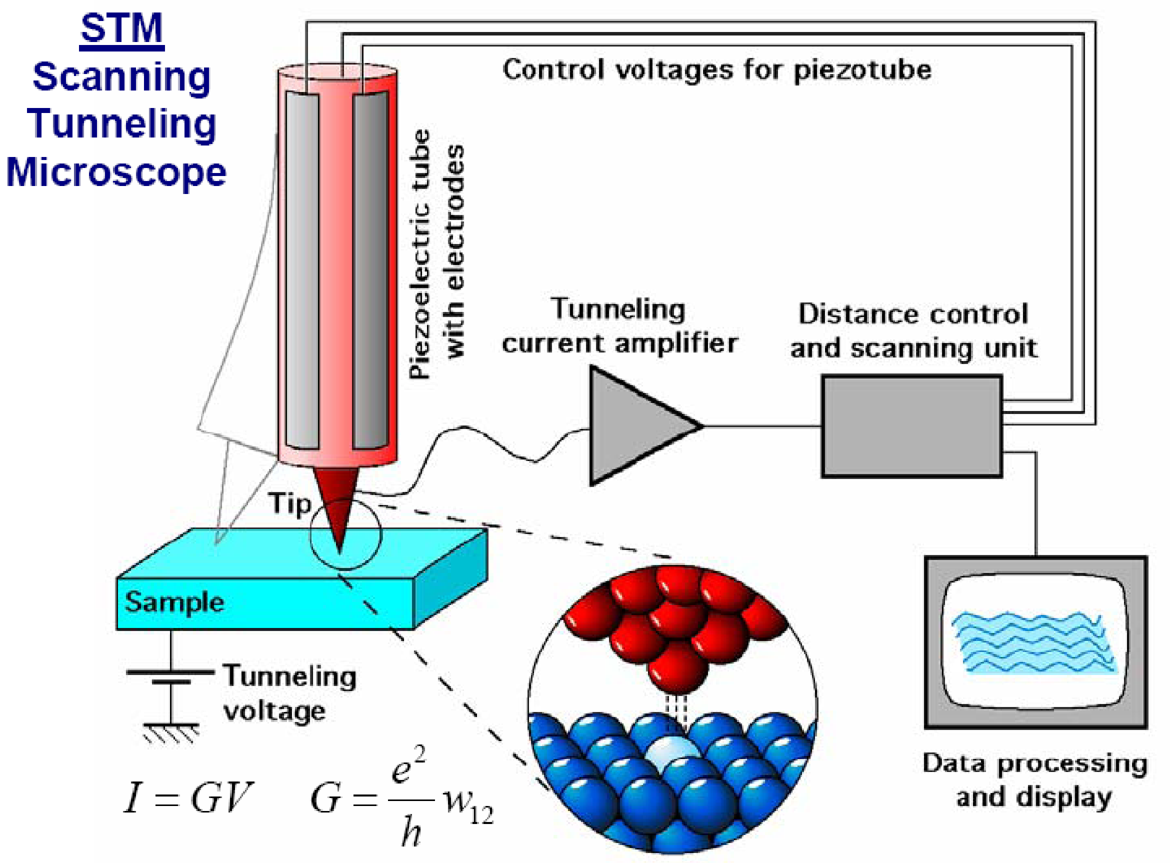
$$= \frac{16}{4 + \left(\frac{k_{II}}{k_1}\right)^2} e^{-2k_{II}L} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \left(\frac{k_{II}}{k_1}\right)^2 = \frac{U-E}{E} \\ k_{II} = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \\ k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{cases}$$

$$\approx e^{-2k_{II}L}$$

- T hängt exponentiell von der Barrierenhöhe ab
- T kann aus Teilchenfluss durch eine Tunnelbarriere experimentell bestimmt werden (z.B. ein elektrischer Strom)

9.2.3 Das Raster-Tunnel-Mikroskop
Scanning Tunneling Microscope (STM)

eine Anwendung des Tunnel-Effekts in der Mikroskopie

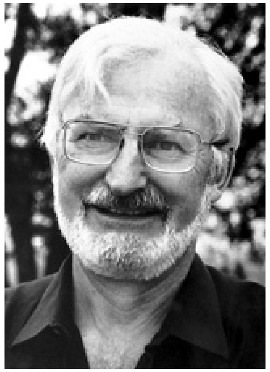


$$I = GV \qquad G = \frac{e^2}{h} w_{12}$$

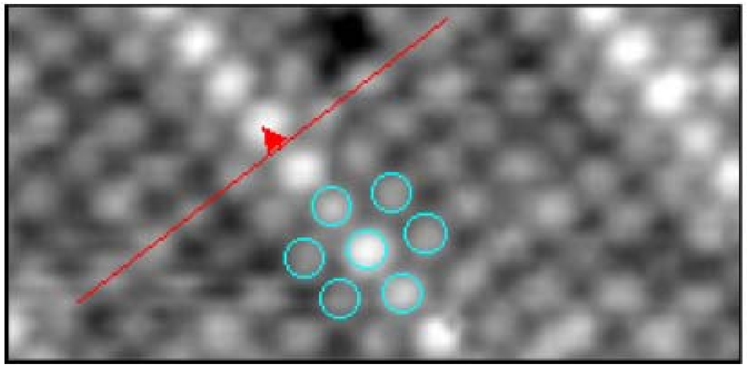
Nobel Prize in Physics (1986)

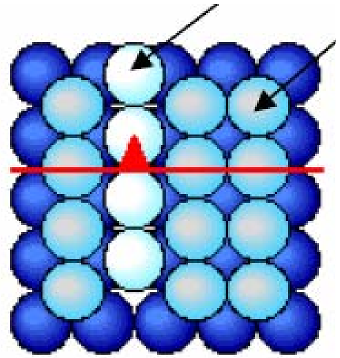
"for their design of the scanning tunneling microscope"

Gerd Binnig



Heinrich Rohrer



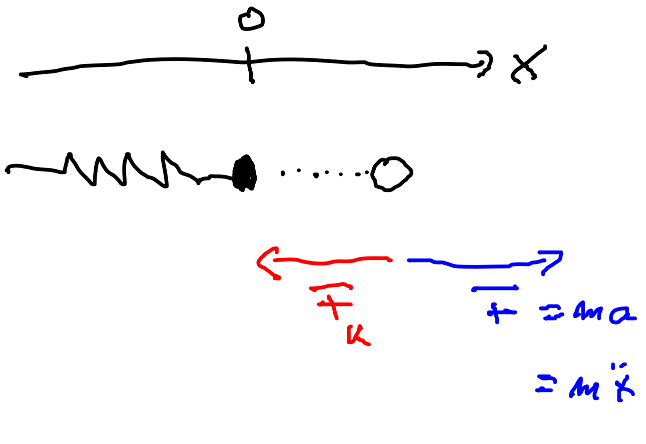


geteilt mit Ernst Ruska (Elektronenmikroskop)

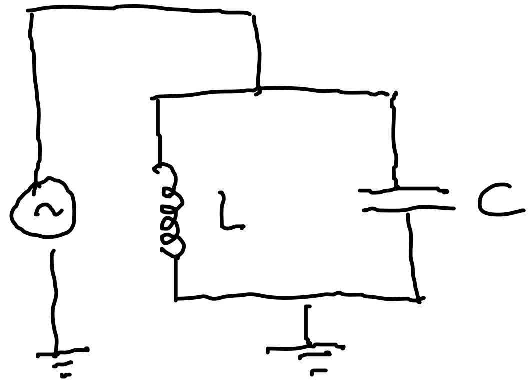
9.3 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

grundlegende Eigenschaften:
- Oszillation um einen Ruhepunkt
- lineare Rückstellkraft
- eine feste von der Amplitude unabhängige Oszillationsfrequenz

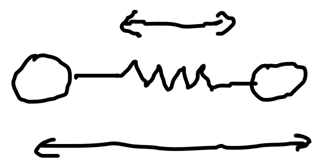
Beispiele:
- mechanischer Oszillator, z.B. Federpendel
- elektrischer Oszillator, z.B. LC-Schwingkreis
- (zweiatomige) Moleküle
- Gitterschwingungen in einem Kristall



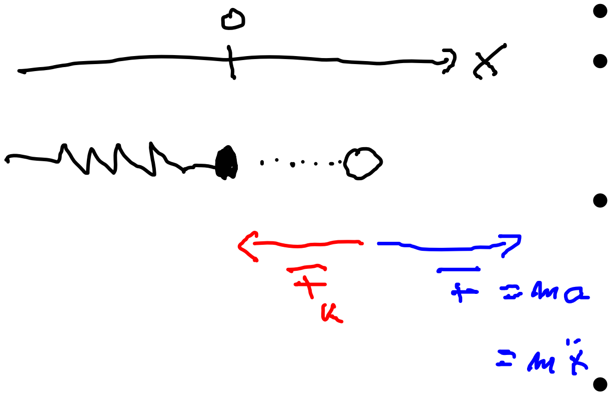
Masse an einer Feder



elektrischer Oszillator


zweiatomiges Molekül

9.3.1 Die Bewegungsgleichung



- harmonische Oszillation verlangt lineare Rückstellkraft
- Hookesches Gesetz

$$F_k = -k x$$

- Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators

$$m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + k x = 0 \qquad \text{for } x(t)$$

- allgemeine Lösung

$$x(t) = A \cos(2\pi \nu t + \phi)$$

- Frequenz des Oszillators $\quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

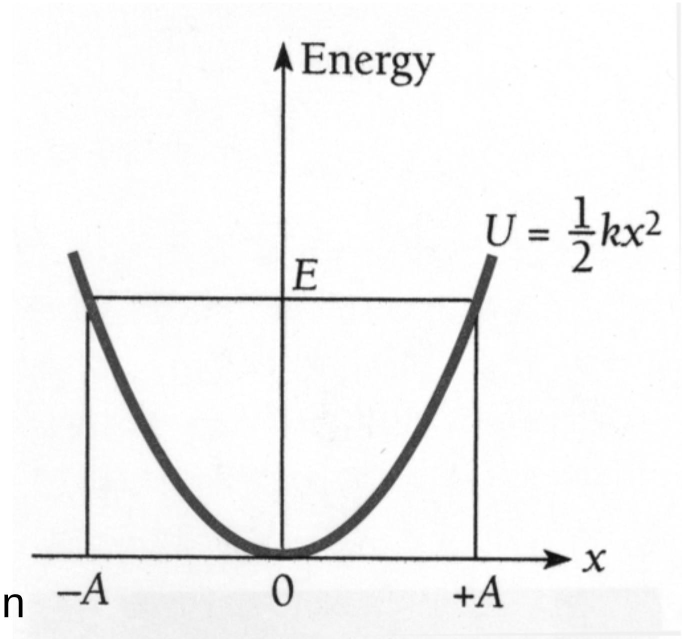
Bemerkung:
- in vielen physikalischen Systemen ist die Rückstellkraft nicht strikt linear in der Auslenkung, besonders für grosse Auslenkungen
- für kleine Auslenkungen gilt die Näherung des harmonischen Oszillators jedoch häufig gut
- betrachte die Taylor-Entwicklung einer beliebigen Rückstellkraft um ihre Ruhelage

$$F(x) = F_{x=0} + \left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{x=0} x + \frac{1}{2} \left.\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right|_{x=0} x^2 + \frac{1}{6} \left.\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}\right|_{x=0} x^3 \ldots$$

$$= \sum_i \frac{1}{i!} \left.\frac{\partial^i}{\partial x^i} F(x)\right|_{x=x_0} (x - x_0)^i$$

9.3.2 Potential zum Hooke'schen Gesetz

$$U = \int_0^x -F(x)\,dx = \int_0^x kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2$$



- dieses Potential *U* wird bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators verwandt

Erwartungen:

- nur diskrete Energien werden erlaubt sein

- die niedrigste mögliche Energie wird nicht $E = 0$ sein sondern einen endlichen Wert $E = E_0$ haben

- das Teilchen wird sich mit endlicher Wahrscheinlichkeit in den Wänden des Potentialtopfs aufhalten (= die maximal möglichen quantenmechanischen Oszillations-Amplituden sind grösser als die klassisch erlaubten)

- Die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$$