• Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + V u = E u}$$

Welche anderen physikalischen Phänomene werden durch Gleichungen von dieser Struktur beschrieben?

Bemerkung: Diese Gleichung ist analog zu der einer Differentialgleichung, die eine stehende Welle beschreibt $\nabla^2 u + k^2 u = 0$
mit $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$.

• Eigenschaften der Lösungen $\psi$ der Schrödinger-Gleichung

- Normierbarkeit: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^* u \, dx = 1$$

- Verhalten für $x \to \infty$:

$$\psi(x,t) = 0$$

$$u(x) = 0$$

- Stetigkeit, Eindeutigkeit, Endlichkeit:

$\psi(x)$, $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, $u(x)$, $\frac{\partial u}{\partial x}$ müssen eindeutig, stetig und endlich sein.

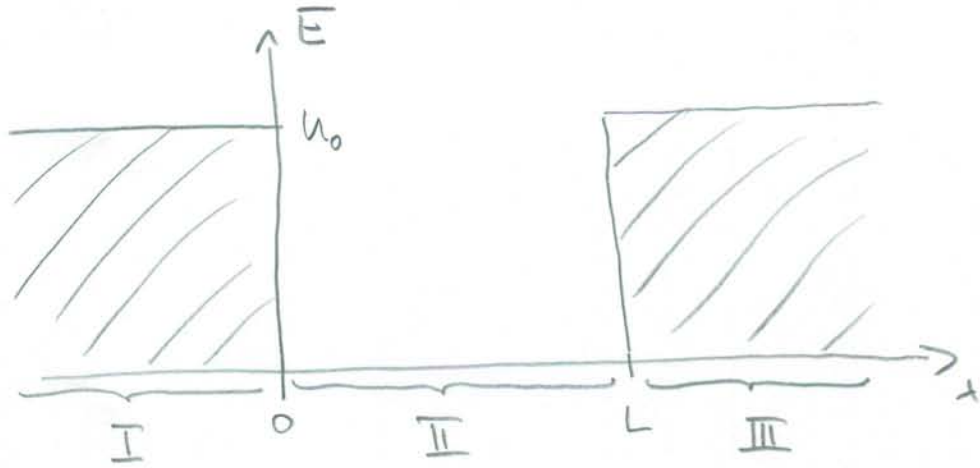
- Superpositionsprinzip

Eine beliebige lineare Kombination $\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$ von Lösungen $\Psi_1$ und $\Psi_2$ der Schrödinger-Gleichung ist auch eine Lösung, da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist.

- Akademische Ausnahmefälle:
  - ebene harmonische Materiewellen erfüllen weder Normierbarkeit noch verschwinden sie für $x \to \infty$.
  - physikalisch unrealistische Randbedingungen, wie z.B. für das Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden erfüllen die Stetigkeitsbedingungen nicht.

Beispiel auf Folien: Teilchen im Potentialtopf.

# Potentialtopf in 1D mit endlich hohen Wänden




- Potential: I: $V = U_0$ für $x \leq 0$

  II: $V = 0$ für $0 < x < L$

  III: $V = U_0$ für $x \geq L$

- betrachte gebundenes Teilchen mit $E < U_0$
- löse zeitunabhängige SGL in den Regionen I, II, III und beachte Stetigkeit von $u$ und $\frac{\partial u}{\partial x}$

SGL
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u + Vu = Eu$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}u + \underbrace{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}_{k^2}u = 0$$

Was bedeuten komplexe bzw. reelle $k$ für die Wellenfunktion?

$k$: Wellenvektor der Materiewelle

$\Rightarrow$ reell für $E - V > 0$

$\Rightarrow$ komplex für $E - V < 0$

- allgemeine Lösung

Region I $(-\infty < x \leq 0)$:

$$u_I(x) = \cancel{C e^{ik_I x}} + D e^{-ik_I x}$$

$\rightarrow$ exponentiell abfallende Wellenfunktion für $x < 0$

$$\text{mit } k_I = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} = i\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$$

Region II $(0 < x < L)$:

$\rightarrow$ oszillierende Wellenfunktion

$$u_{II}(x) = A \sin k_{II} x + B \cos k_{II} x$$

$$\text{mit } k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Region III $(L \leq x < \infty)$:

$\rightarrow$ exponentiell abfallende Wellenfunktion $(x > 0)$

$$u_{III} = F e^{ik_{III} x} + \cancel{G e^{-ik_{III} x}}$$

$$\text{mit } k_{III} = i\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$$

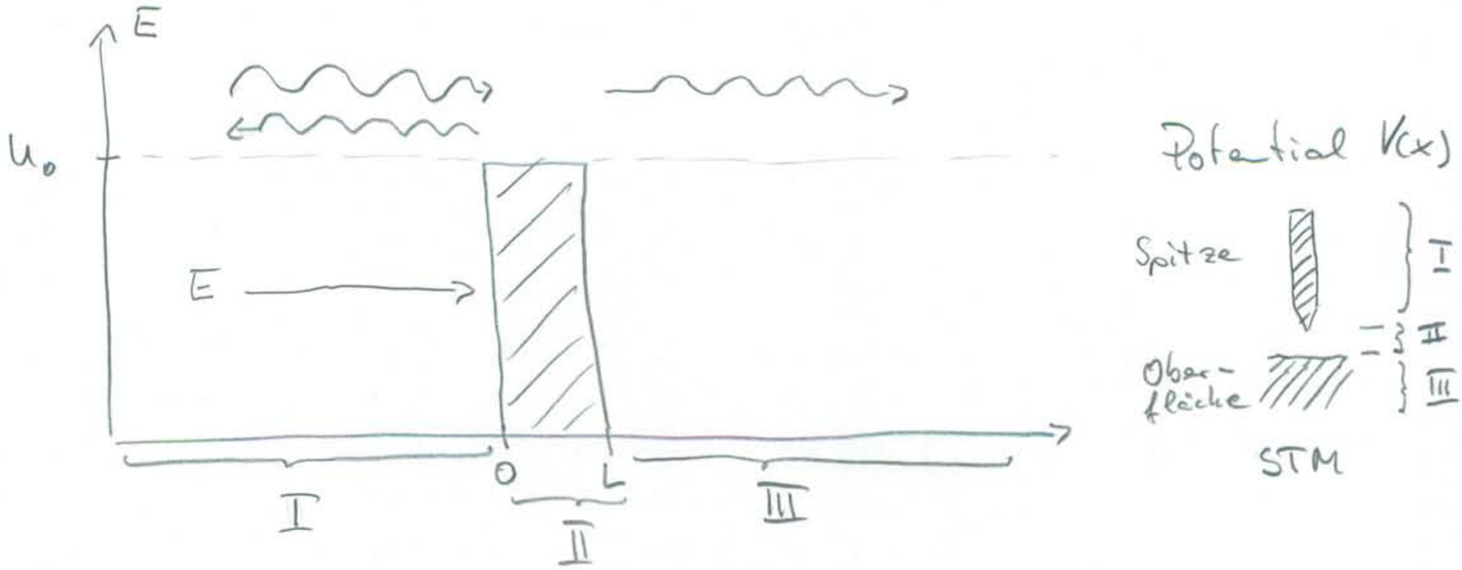
Lösungen der Wellenfunktionen auf Folien bzw. im QM auf dem Computer!

- finde Koeffizienten A, B, D, F unter Verwendung der Randbedingungen

$$\left.\begin{aligned} u_I(0) &= u_{II}(0) \\ u_{II}(L) &= u_{III}(L) \end{aligned}\right\} \text{ Stetigkeit der Wellenfunktion}$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial u_I}{\partial x}(0) &= \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(0) \\ \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(L) &= \frac{\partial u_{III}}{\partial x}(L) \end{aligned}\right\} \text{ Stetigkeit der Ableitungen der Wellenfunktion}$$

# Der Tunneleffekt




- Betrachte Teilchen mit Energie $E < u_0$

- Schrödinger-Gleichung in Regionen I, II, III

$$\text{I}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{I}} = E\, u_{\text{I}}$$

$$\text{II}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{II}} + u_0 u_{\text{II}} = E\, u_{\text{II}}$$

$$\text{III}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{III}} = E\, u_{\text{III}}$$

Zeige analytische Lösung im MMA.

- Die Lösungen in I, II, III

$$\text{I}: \quad u_{\text{I}} = \underbrace{A e^{i k_{\text{I}} x}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{B e^{-i k_{\text{I}} x}}_{\text{reflektierte Welle}} \qquad \text{mit } k_{\text{I}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{II}: \quad u_{\text{II}} = C e^{k_{\text{II}} x} + D e^{-k_{\text{II}} x} \qquad \text{mit } k_{\text{II}} = \frac{\sqrt{2m(u_0 - E)}}{\hbar}$$

zerfallende Wellenfunktion in der Barriere

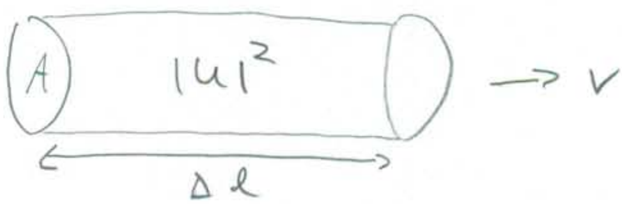
III : $u_{III} = \underbrace{F e^{i k_{III} x}}_{\text{rechtslaufende Welle}} + \underbrace{\cancel{G e^{-i k_{III} x}}}_{\text{linkslaufende Welle}}$ mit $k_{III} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k_I$

- betrachte den Teilchenfluss S zur Berechnung des Reflexions bzw. Transmissions Koeffizienten

$$S = |u|^2 v$$

$v$: Teilchengeschwindigkeit
$|u|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte

Vgl. Stromprobleme:




- Transmissionswahrscheinlichkeit oder Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{|u_{III}|^2 v_{III}}{|u_I|^2 v_I} \approx \frac{F F^*}{A A^*} \frac{v_{III}}{v_I}$$

- Bestimme Koeffizienten A, B, C, D, F aus Randbedingungen

$$\left.\begin{aligned} u_I(0) &= u_{II}(0) \\ u_{II}(L) &= u_{III}(L) \end{aligned}\right\} \text{stetige Aufenthaltswahrscheinlichkeit}$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial u_I}{\partial x}(0) &= \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(0) \\ \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(L) &= \frac{\partial u_{III}}{\partial x}(L) \end{aligned}\right\} \text{stetiger Teilchenfluss}$$

- Lösung der Gleichungen nach $\frac{A}{F}$ :

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

⇒ Vereinfachung für den Fall kleiner Teilchenenergie $E$ gegenüber Barrierehöhe $U_0$

① $E \ll U_0 \Rightarrow k_{II} \gg k_I$

$$\Rightarrow \frac{k_{II}}{k_I} - \frac{k_I}{k_{II}} \approx \frac{k_{II}}{k_I}$$

② $e^{k_{II}L} \gg e^{-k_{II}L}$

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

- damit ergibt sich der Transmissionskoeffizient für $v_{III} = v_I$ zu

$$T = \frac{FF^*}{AA^*} = e^{-2\underbrace{k_{II}}_{\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}}L}\left(\frac{16}{4 + \underbrace{\left(\frac{k_{II}}{k_I}\right)^2}_{= \frac{U_0}{E} - 1}}\right)$$

⇒ starke exponentielle Energie- und Längenabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten