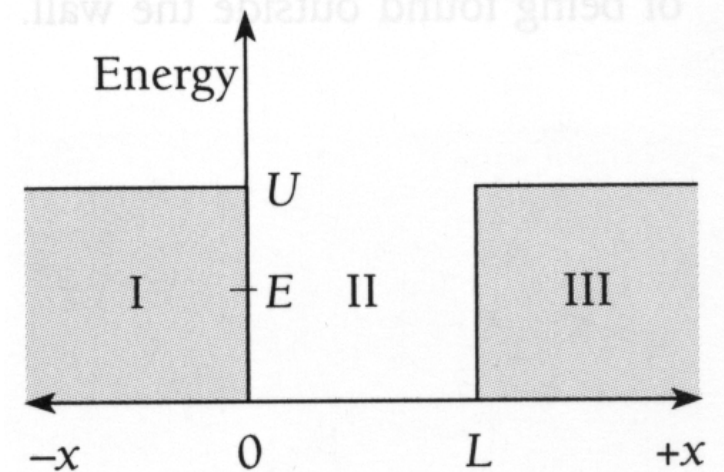


8. Eindimensionale (1D) quantenmechanische Probleme

8.1 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: $U_0 > E$

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

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

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

Lösungen:

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

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

allgemeine Lösung:

- in Bereich I und III:

$$\psi_{\text{I}} = C e^{ax} + \cancel{D e^{-ax}} \quad -\infty < x < 0$$
$$\psi_{\text{III}} = \cancel{F e^{ax}} + G e^{-ax} \quad L < x < \infty$$

$D = F = 0$: sonst Divergenz von ψ

- in Bereich II:

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

- mit Randbedingungen

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

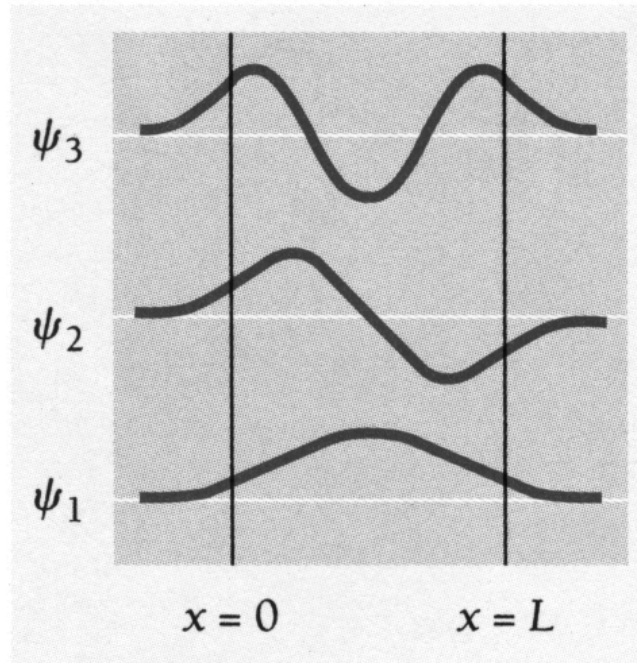
$$\psi_{\text{II}}(x=L) = \psi_{\text{III}}(x=L)$$

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

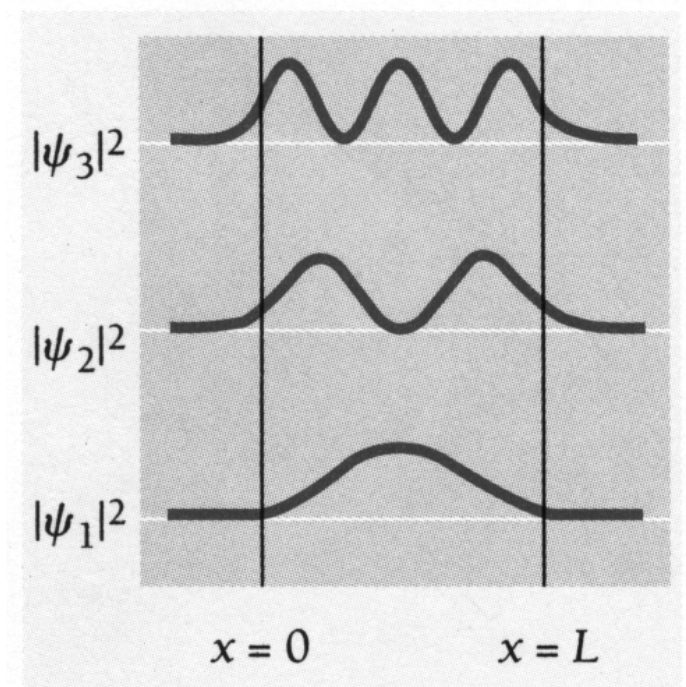
$$\frac{\partial \psi_{\text{III}}}{\partial x}(x=L) = \frac{\partial \psi_{\text{II}}}{\partial x}(x=L)$$

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 $E < U_0$

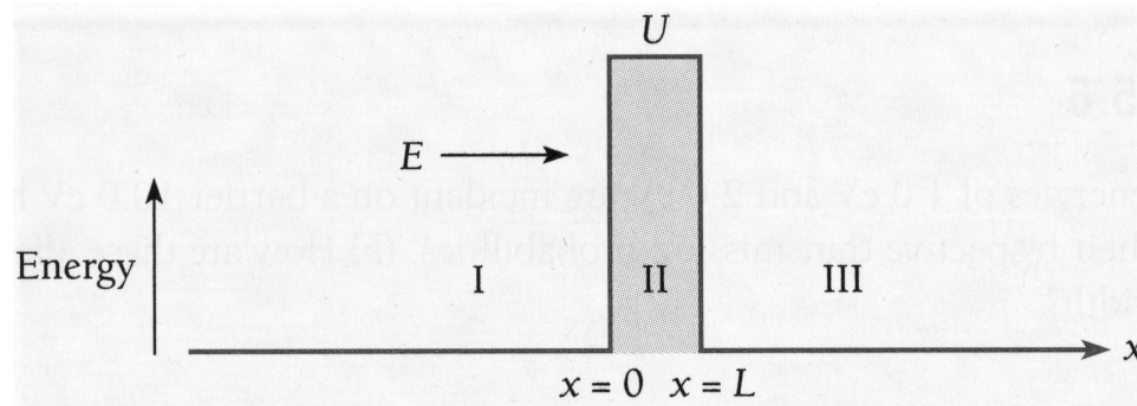
- Fragen:**
- Wie erzeugt man einen Potentialtopf?
 - Wie lädt man ein einzelnes Teilchen in einen Potentialtopf?
 - Wie verlässt das Teilchen den Potentialtopf?

physikalische Beispiele für Teilchen im Potentialtopf:

- Quantenpunkte

8.2 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 tunnelt 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

8.2.1 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

$$T = e^{-2k_{II}L} \quad \text{mit} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

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

Beispiel:

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

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

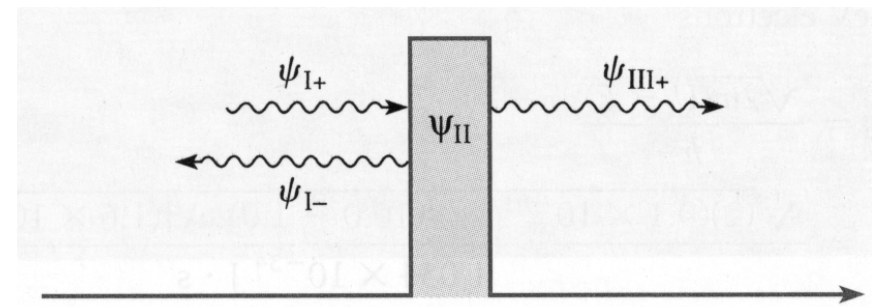
- selbst für leichte Teilchen und niedrige Barrieren ist T klein
- der Tunneleffekt kann experimentell beobachtet werden und wird z.B. in elektronischen Bauelementen angewandt

8.2.2 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 $U > E$

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

- 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 ($x = 0$)

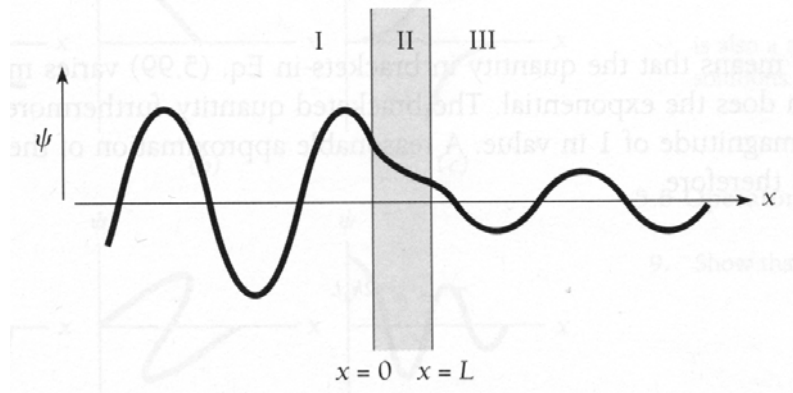
$$\psi_I = \psi_{II} \quad ; \quad \frac{\partial \psi_I}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}$$

- 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

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

Vereinfachungen:

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

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

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

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

Daher:

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

Transmissions-Koeffizient:

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

$$= \frac{16}{4 + \left(\frac{k_{II}}{k_I} \right)^2} e^{-2k_{II}L}$$

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

$$\text{mit } \begin{cases} \left(\frac{k_{II}}{k_I} \right)^2 = \frac{U-E}{E} \\ k_{II} = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \\ k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{cases}$$

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

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

eine Anwendung des Tunnel-Effekts in der
Mikroskopie

Nobel Prize in Physics (1986)

"for their design of the scanning tunneling
microscope"

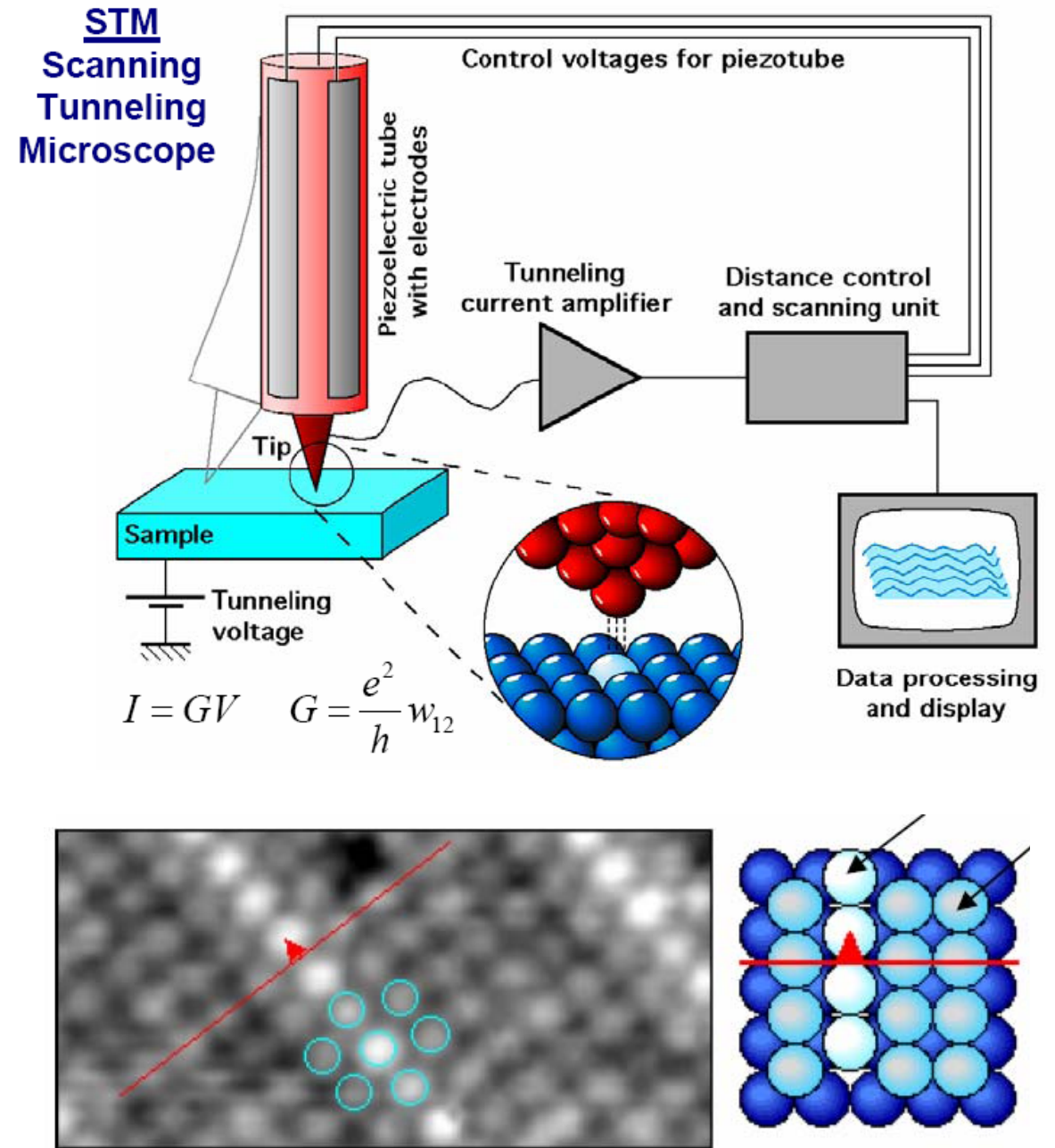


Gerd Binnig



Heinrich Rohrer

geteilt mit Ernst Ruska
(Elektronenmikroskop)



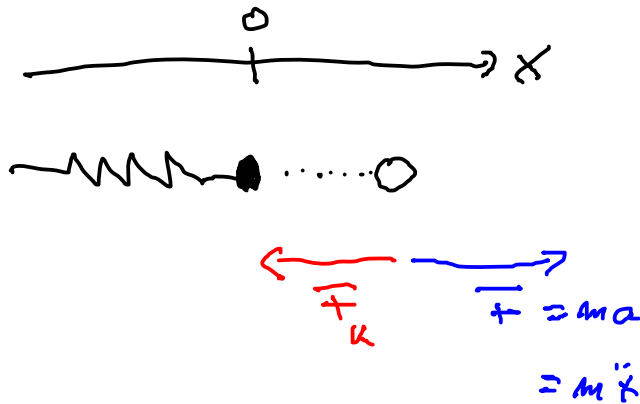
8.3 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

grundlegende Eigenschaften:

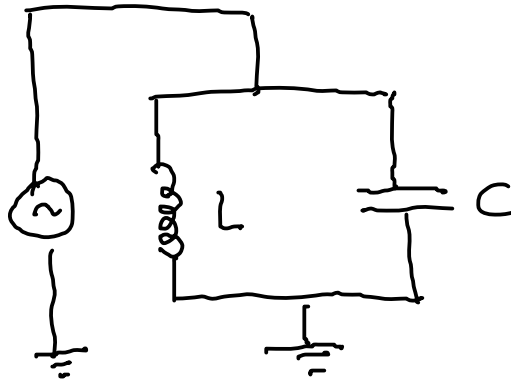
- Oszillation um einen Ruhepunkt
- lineare Rückstellkraft
- eine feste von der Amplitude unabhängige Oszillationsfrequenz

Beispiele:

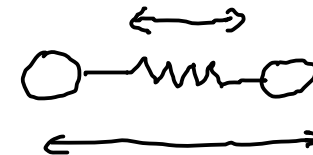
- mechanischer Oszillator, z.B. Federpendel
- elektrischer Oszillator, z.B. LC-Schwingkreis
- (zweiatomige) Moleküle
- Gitterschwingungen in einem Kristall



Masse an einer Feder



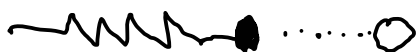
elektrischer Oszillator



zweiatomiges Molekül

8.3.1 Die Bewegungsgleichung

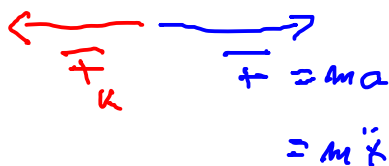
- harmonische Oszillation verlangt lineare Rückstellkraft
- Hookesches Gesetz



$$\vec{F}_k = -kx$$

- Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators

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



- allgemeine Lösung

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

- Frequenz des Oszillators

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

- 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

$$\begin{aligned} \vec{F}(x) &= \vec{F}_{x=0} + \left. \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} \right|_{x=0} x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial x^2} \right|_{x=0} x^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 \vec{F}}{\partial x^3} \right|_{x=0} x^3 \dots \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \left. \frac{\partial^i \vec{F}}{\partial x^i} \right|_{x=x_0} (x-x_0)^i \end{aligned}$$

8.3.2 Potential zum Hooke'schen Gesetz

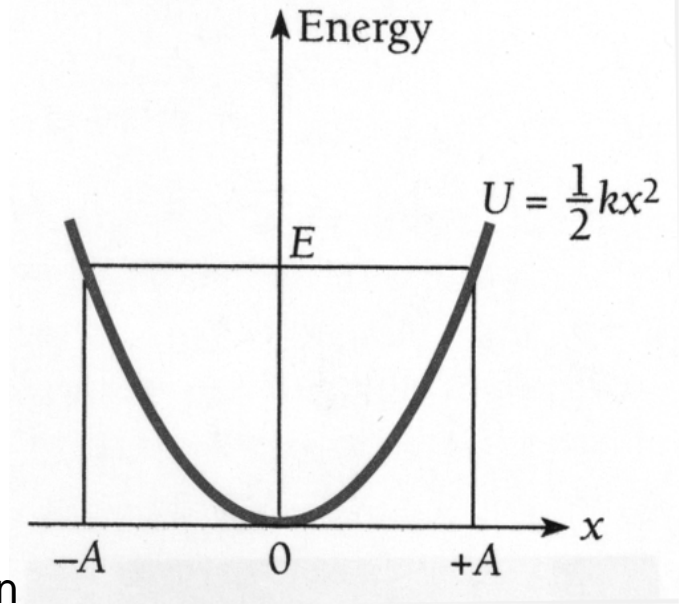
$$U = \int_0^x -\overline{F(x)} dx = \int_0^x kx dx = \frac{1}{2} kx^2$$

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

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:

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



8.3.3 Lösungsansatz für die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators

- Schrödinger-Gl.:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} k x^2 \right) \psi = 0$$

- Normierung: dimensionslose Einheiten \tilde{x} für die Koordinate x und \tilde{E} für die Energie E

$$\tilde{x} = \left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{k m} \right)^{1/2} x = \sqrt{\frac{2\pi m \nu}{\hbar}} x$$

$$\tilde{E} = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar \nu}$$

mit $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

- somit ergibt sich die Schrödinger-Gleichung zu

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \tilde{x}^2} + (\tilde{E} - \tilde{x}^2) \psi = 0$$

- Normierungsbedingung für die Wellenfunktion ψ

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

8.3.4 Quantisierung der Energie

- aus Normierungsbedingung für ψ $\tilde{E} = 2n + 1 = \frac{2E}{h\nu}$ mit $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

- Energie-Niveaus des harmonischen Oszillators

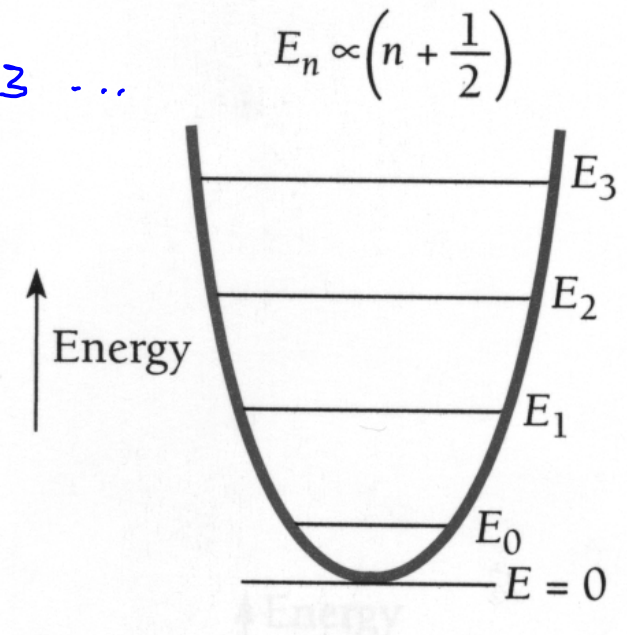
$$E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad E_n \propto \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

- charakteristische Eigenschaft des harmonischen Oszillators:
äquidistante Energie-Niveaus

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = h\nu$$

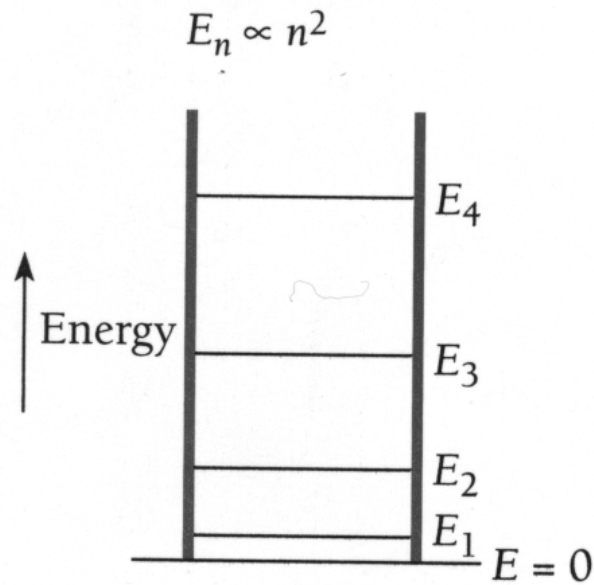
- **Nullpunktenergie** ($n = 0$) niedrigste mögliche Energie eines harmonischen Oszillators

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu$$

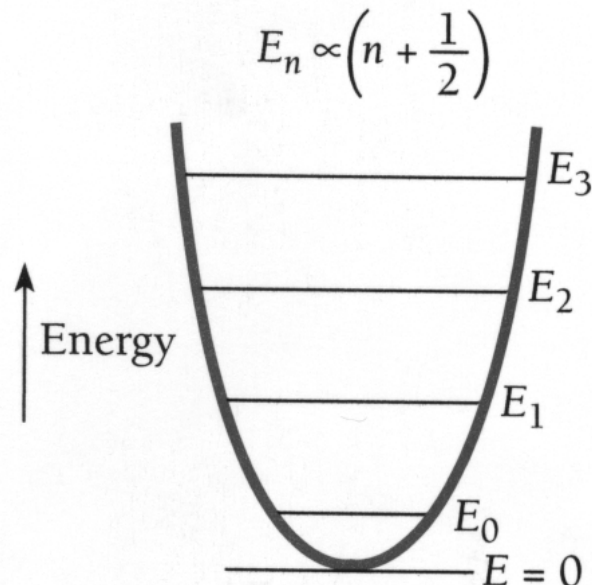


8.3.5 Energie-Niveaus in verschiedenen charakteristischen Potentialen ...

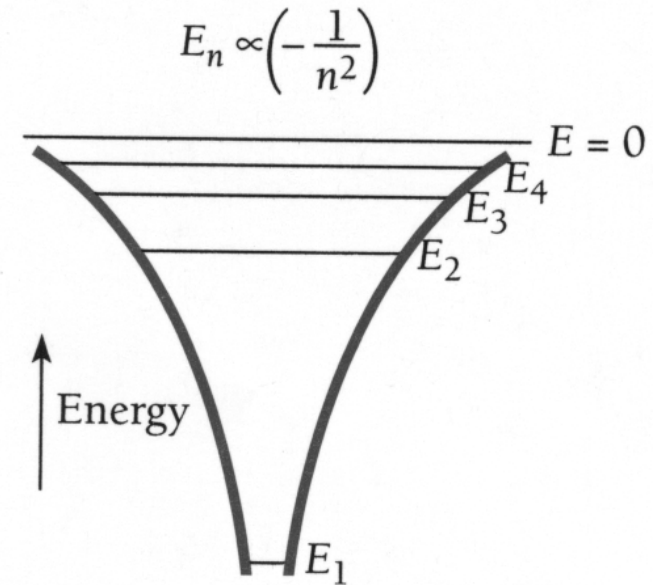
... und ihre Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl n



konstantes Potential:
z.B. Teilchen in einem Potentialtopf



x^2 - harmonisches Potential:
z.B. harmonischer Oszillator



$1/r$ - Zentral-Potential:
z.B. Wasserstoff-Atom

8.3.6 Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

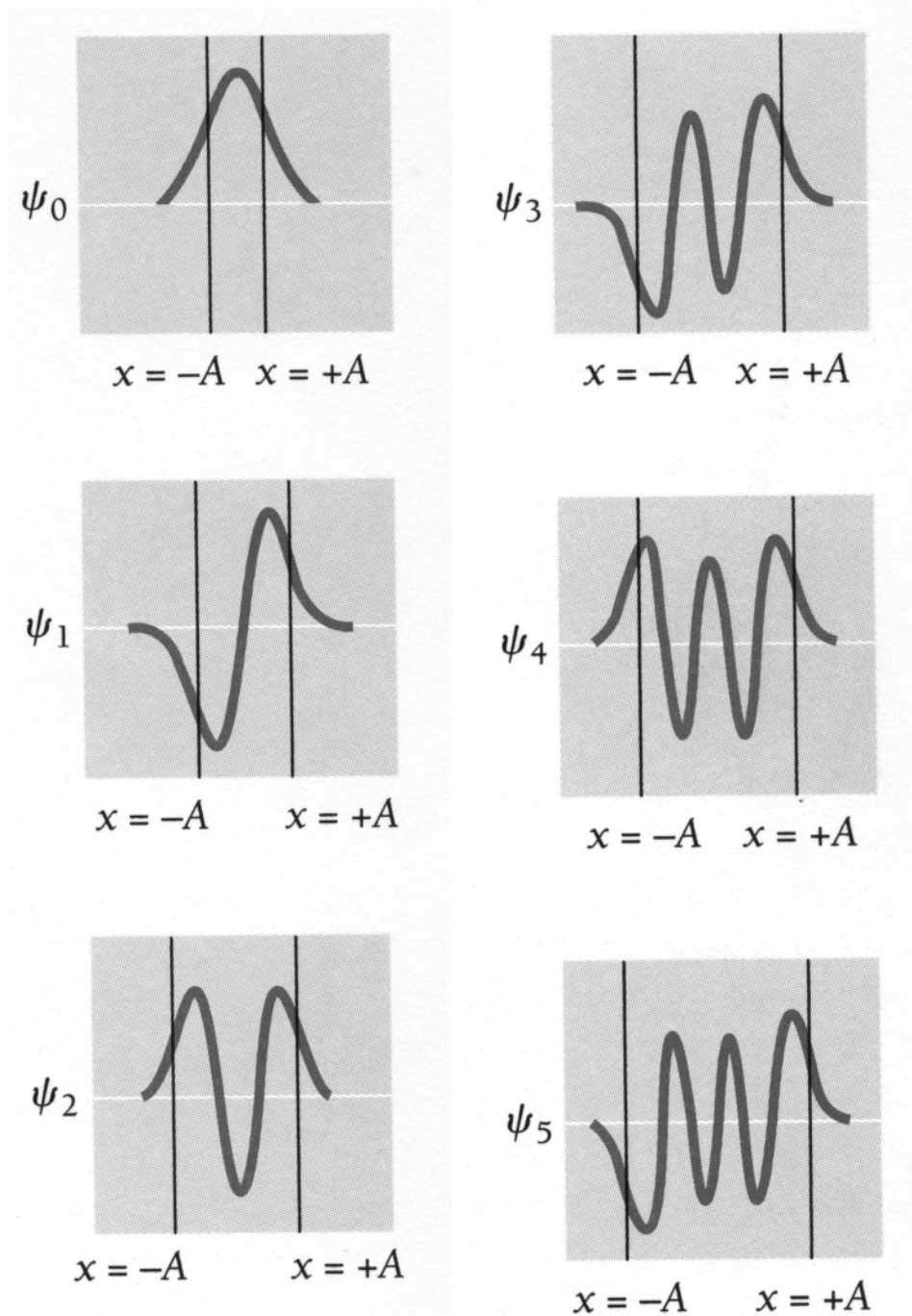
$$\Psi_n = \left(\frac{2m\nu}{\hbar} \right)^{1/4} (2^m n!)^{-1/2} H_n(\tilde{x}) e^{-\tilde{x}^2/2}$$

mit $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

- mit den Hermite-Polynomen H_n

n	$H_n(\tilde{x})$	\hat{E}_n	E_n
0	1	1	$\frac{1}{2} h\nu$
1	$2\tilde{x}$	3	$\frac{3}{2} h\nu$
2	$4\tilde{x}^2 - 2$	5	$\frac{5}{2} h\nu$
3	$8\tilde{x}^3 - 12\tilde{x}$	7	$\frac{7}{2} h\nu$
4	$16\tilde{x}^4 - 48\tilde{x}^2 + 12$	9	$\frac{9}{2} h\nu$
5	$32\tilde{x}^5 - 160\tilde{x}^3 + 120\tilde{x}$	11	$\frac{11}{2} h\nu$

- die vertikalen Linien entsprechen den klassischen maximalen Oszillationsamplituden bei der gegebenen Energie
- quantenmechanisch hält sich der Oszillator mit endlicher Wahrscheinlichkeit außerhalb dieser klassischen Grenzen auf



8.3.7 Erwartungswert der Position, klassisch und quantenmechanisch

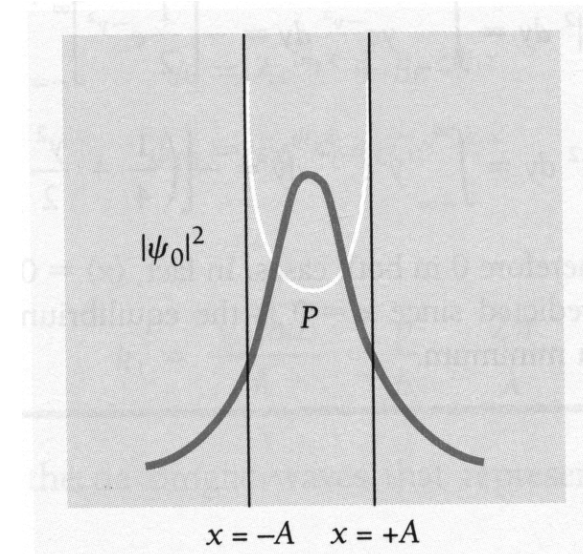
klassisch:

- grösste Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den klassischen Umkehrpunkten ($x = \pm A$) des Oszillators

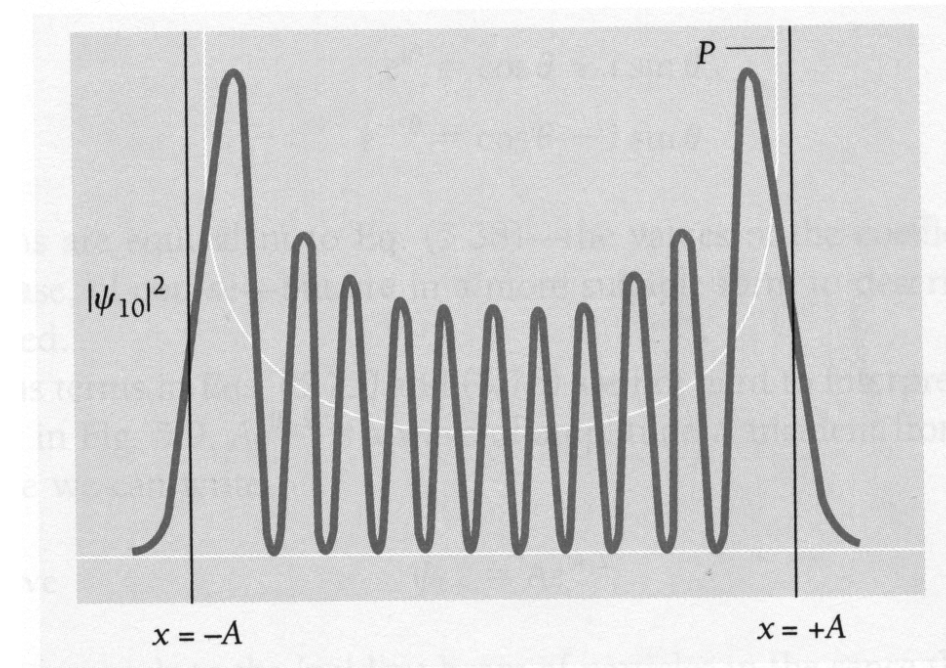
quantenmechanisch:

- im Grundzustand ($n = 0$) ist $|\psi|^2$ am grössten in der Ruhelage ($x = 0$)
- für steigende Hauptquantenzahl n nähert sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung der klassischen an
- Beispiel für das Korrespondenzprinzip für grosse Energien und Quantenzahlen
- die Wahrscheinlichkeit des quantenmechanischen Oszillators sich bei Amplituden grösser als $\pm A$ aufzuhalten sinkt mit steigender Hauptquantenzahl n

$n = 0$:



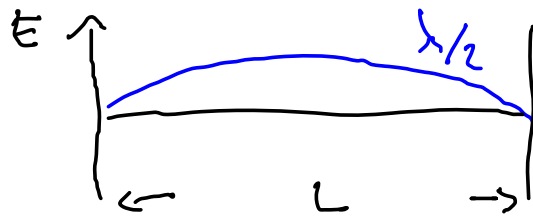
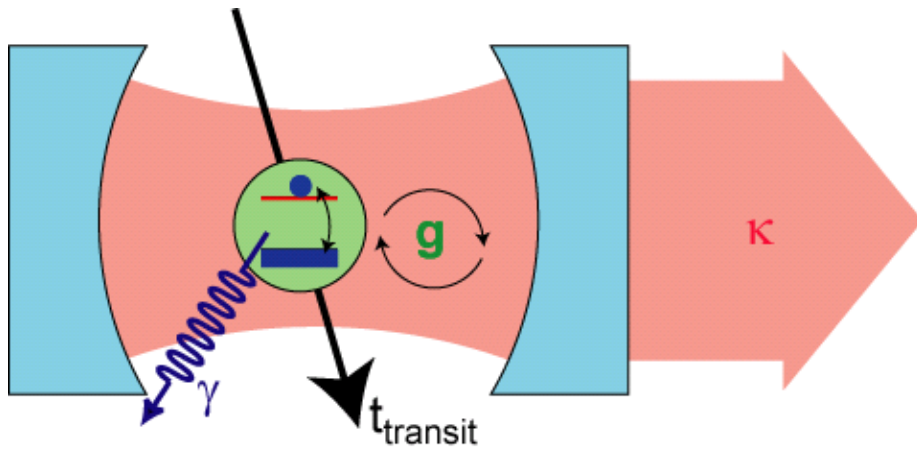
$n = 10$:



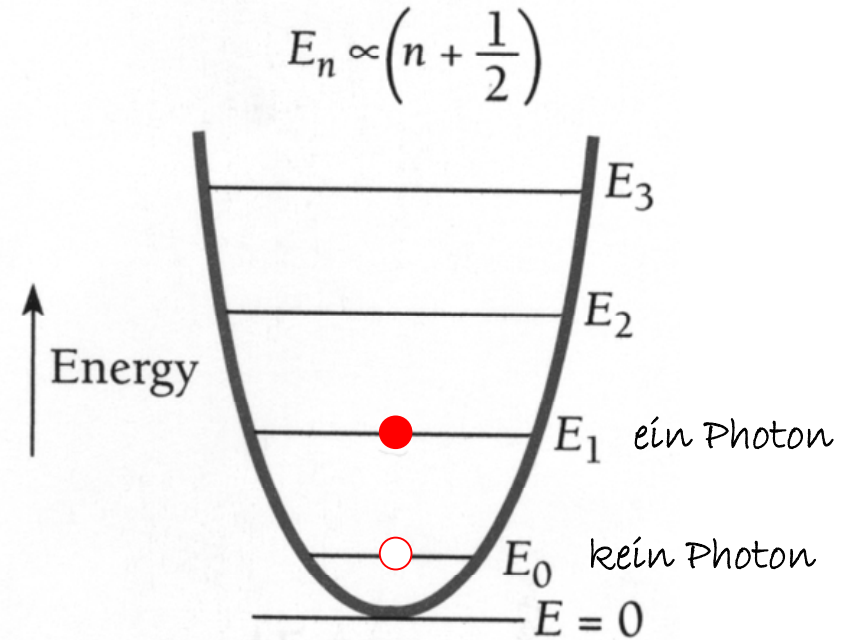
8.3.8 Beispiele für quantenmechanische harmonische Oszillatoren

Hohlraum Quanten-Elektrodynamik (Cavity QED)

Übersichtsartikel: J. M. Raimond, M. Brune, and S. Haroche, Rev. Mod. Phys. 73, 565 (2001)



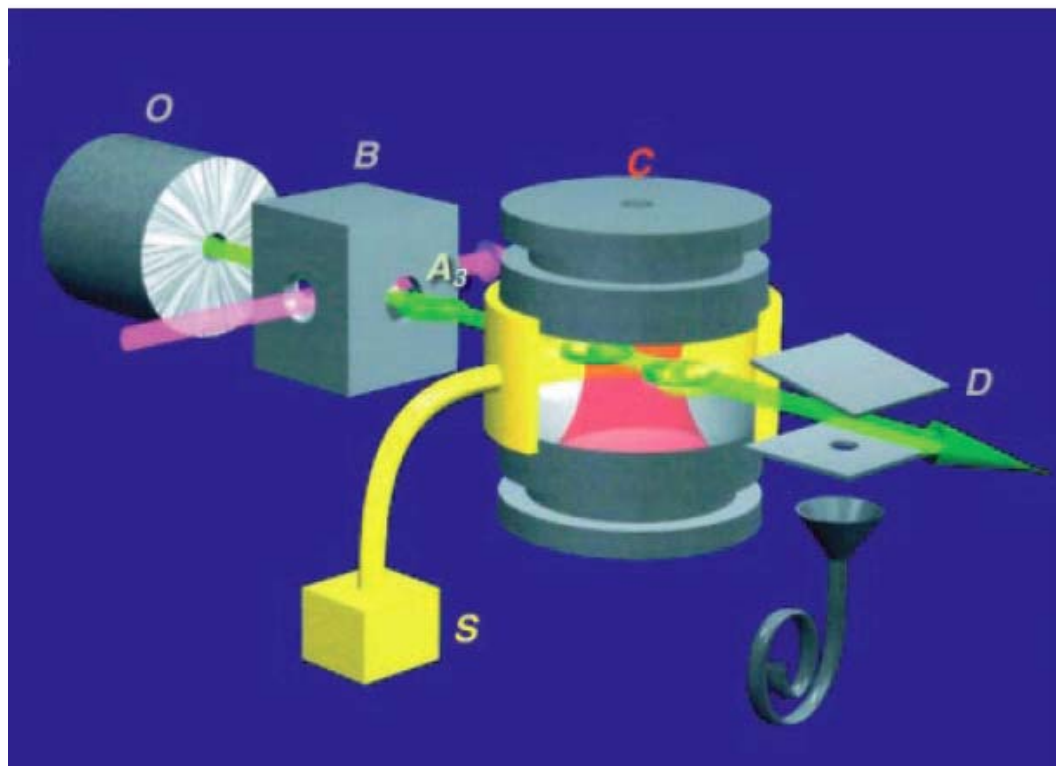
stehende Welle
= Mode
= harmonischer Oszillator



Photonen beschrieben als quantenmechanische Anregungen eines harmonischen Oszillators:

- einzelne Photonen eingefangen zwischen Spiegeln (blau) (eine Hohlraum für Photonen)
- stehende elektromagnetische Welle mit einem einzelnen Photon (rot)
- einzelnes Atom (grün) als Quelle und Detektor für einzelne Photonen

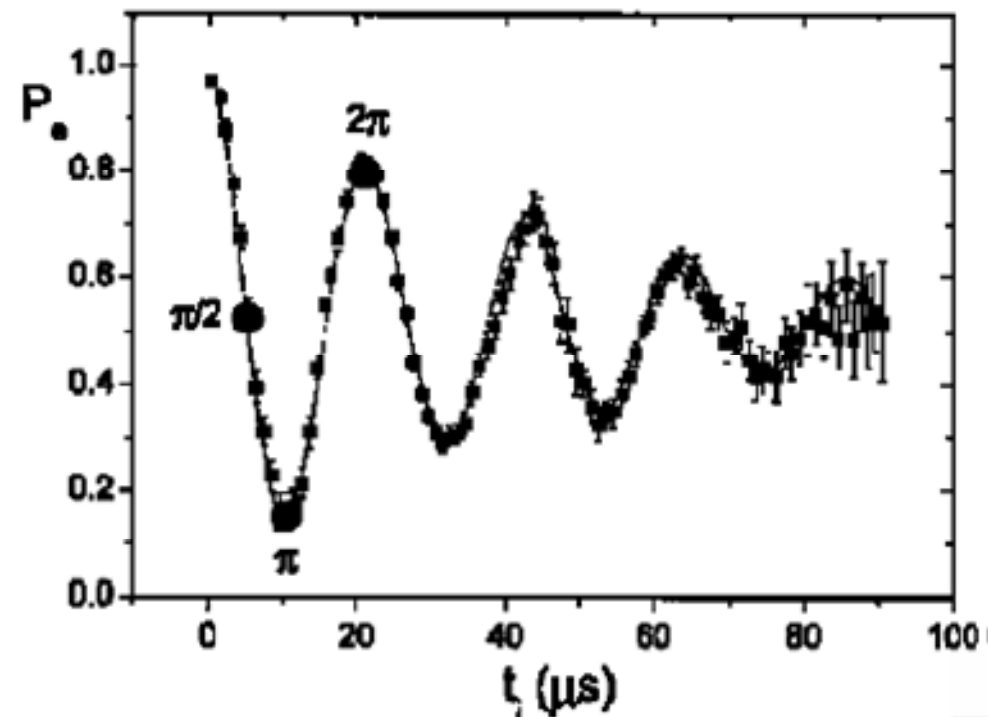
Hohlraum Quantenelektrodynamik (QED) mit Rydberg-Atomen



Aufbau:

- Ofen (O) zur Erzeugung von freien Atomen
- Wechselwirkung mit Lasern (B) erzeugt Rydberg-Zustände
- Hohlraumresonator (C) aus zwei Spiegeln zum speichern von einzelnen Photonen
- Ionisationsdetektor (D)

Thema für Vortrag: Cavity QED (J. M. Raimond, M. Brune, and S. Haroche, ENS, Paris)

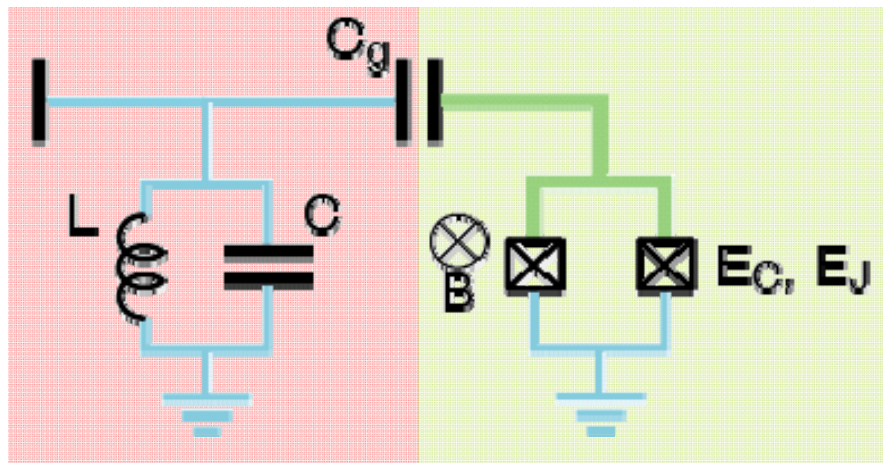


Beobachtung:

- periodische Emission und Reabsorption eines einzelnen Photons durch ein einziges Rydberg-Atom
- Quantenmechanik mit einzelnen Photonen und einzelnen Atomen.

Der elektrische quantenmechanische harmonische Oszillator

schematische Darstellung der elektrischen Schaltung

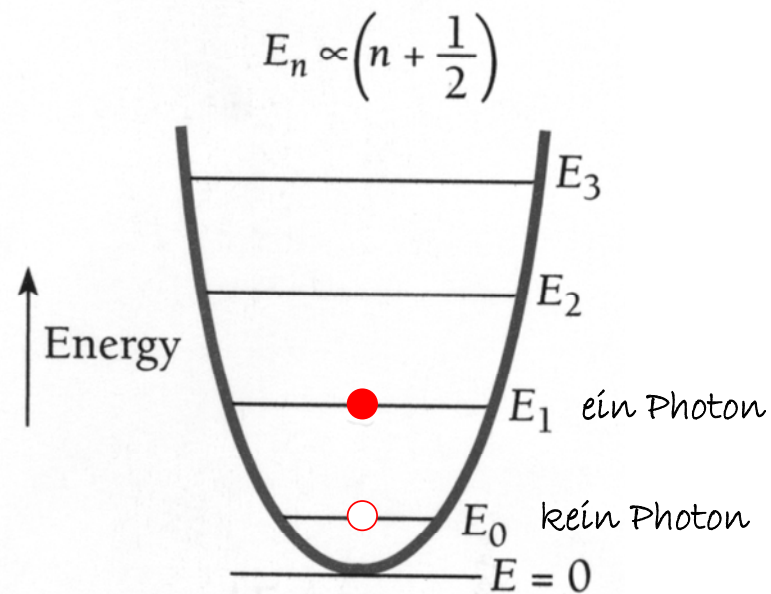


elektrischer
harmonischer
LC-Schwingkreis:

- Induktivität L
- Kapazität C

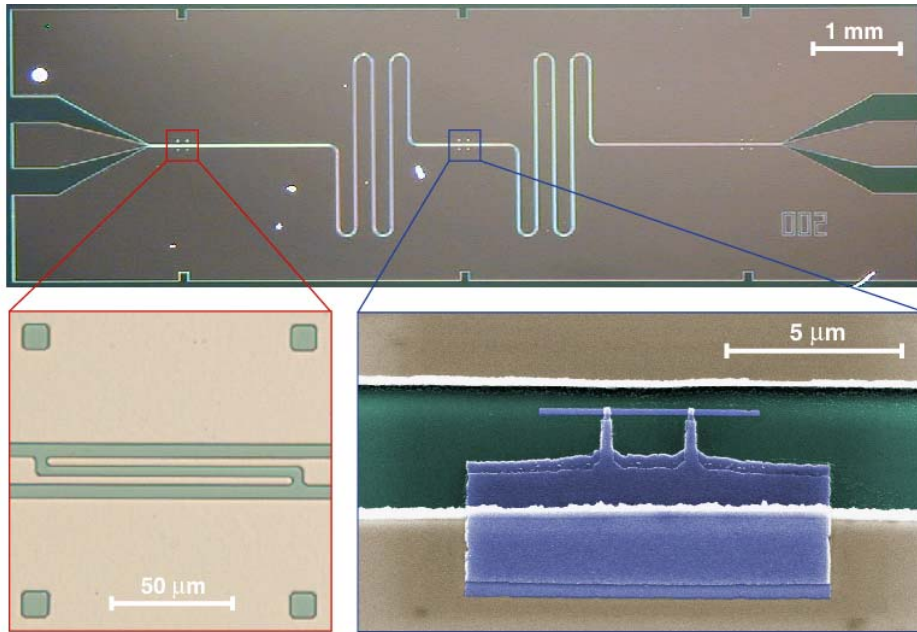
elektrisches künstliches Atom
(Elektron-Paare im
Potentialtopf) mit nicht
äquidistanten diskreten Energie-
Niveaus:

- charakteristische Energien
- Ladungsenergie E_C
 - Josephson Energie E_J



Experiment: Der erste quantenmechanische harmonische Oszillator in einer elektrischen Schaltung

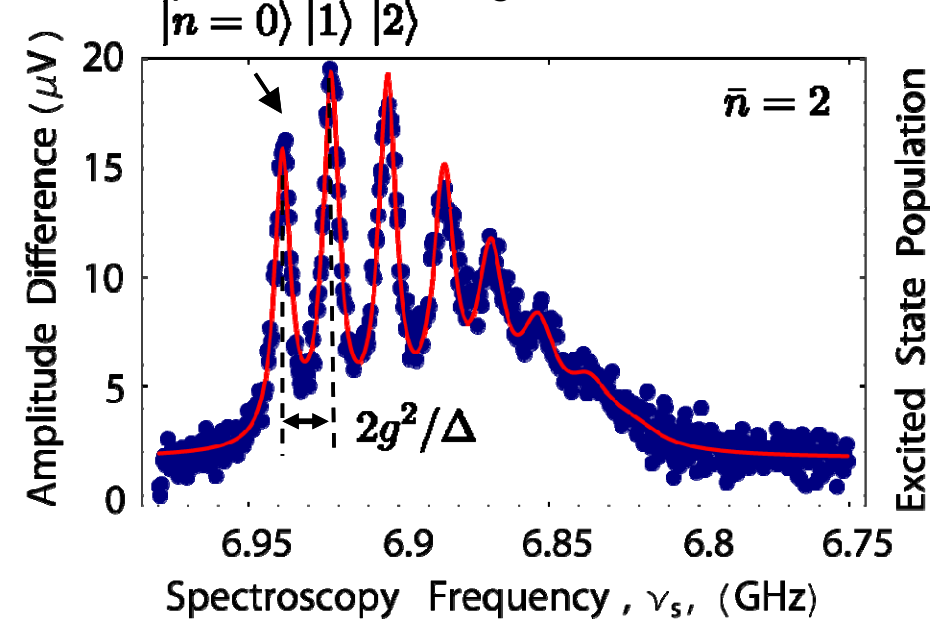
planarer Wellenleiter als integrierter harmonischer Oszillator



- künstliches Atom (blau)
- harmonischer LC-Oszillator (grau)

A. Wallraff *et al.*, *Nature* (London) **431**, 162 (2004)

ein Beispiel: Beobachtung einzelner Photonen



- Spektrum eines künstlichen Atoms
- eine Spektrallinie für jeden Photonzustand $n = 1, 2, 3, \dots$
- Intensitäten der Linien sind proportional zur Besetzungswahrscheinlichkeit des Zustands

D. Schuster *et al.*, *Nature* **445**, 515 (2007)

einführender Artikel: R. J. Schoelkopf and S. Girvin, *Nature* (London) **451**, 664 (2008)