

1.3. Wellenfunktionen

1.3.1. Materiewellen

Die Welleneigenschaften von Materie legen die Suche nach einer Wellengleichung nahe.
Randbedingungen für Wellen sind eine Ursache für das Auftreten der Quantisierung.

➔ Stehwellen

Ein grundlegender Ausgangspunkt ist die Zuordnung der Energie E eines Teilchens zu einer Welle mit der Frequenz ω :

$$\omega = E/\hbar$$

Die allgemeine Form einer ebenen Welle ist: $\psi(r, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$

mit der Phasengeschwindigkeit: $v_\phi = \frac{\omega}{k}$

Die ebene Welle ist im Raum delokalisiert!

Lokalisierten Teilchen um einen Raumpunkt r entsprechen Wellenpakete.

$$\psi(r, t) = \int f(k) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} dk \quad \text{Wellenpaket}$$

Für Teilchen mit einem (in etwa) definierten Impuls ist die Verteilung $f(k)$ nur um einen kleinen Bereich $k=k_0$ von Null verschieden

Beispiel: Eindimensionales Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int f(k) e^{i\phi} dk \quad \phi = kx - \omega t$$

Der Beitrag zum Wellenpaket von k -Vektoren um einen Wert $k=k_0$ ist nur für einen Bereich Δk nennenswert:

$$\left| \frac{d\phi}{dk} \right| \leq \frac{1}{\Delta k}$$

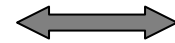
Änderung der Phase an $k=k_0$ Gangunterschied

Mit $\frac{d\phi}{dk} = x - t \frac{d\omega}{dk} \leq 1/\Delta k$ folgt:

➔ Das Wellenpaket ist um einen kleinen Bereich $\Delta x \approx \frac{1}{\Delta k}$ konzentriert.

➔ Das Wellenpaket bewegt sich mit einer Geschwindigkeit $v_G = \frac{d\omega}{dk}$.

v_G ist die Gruppengeschwindigkeit



Zusammenhang mit klassischer Teilchengeschwindigkeit

Klassisch gilt: $v_{cl} = \frac{dE}{dp}$

mit $E = \hbar\omega \longrightarrow v_{cl} = \hbar \frac{d\omega}{dp} = v_G = \frac{d\omega}{dk}$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

Es folgt somit die De Broglie-Beziehung!
(möglich additive Konstante wird null gesetzt)

Insgesamt:

$$p = \hbar k \quad \text{und} \quad E = \hbar\omega$$

1.3.2 Die Schrödingergleichung

Motivation

Welcher Bewegungsgleichung genügt nun das Wellenpaket $\psi(r, t)$?

Allgemeine Anforderungen an die Bewegungsgleichung:

1) Die Gleichung muss linear und homogen sein. \longrightarrow Superpositionseigenschaft
Falls λ_1 und λ_2 Lösungen sind, dann auch $c_1\lambda_1+c_2\lambda_2$!

2) Die Gleichung muss erster Ordnung in der Zeit sein.
Der Zustand des Systems ist durch $\psi(r, t)$ vollständig (und für alle Zeiten) bestimmt.

3) Das Korrespondenzprinzip muss gelten.
Die Struktur der Gleichungen muss für „makroskopischere“ Systeme in die klassischen übergehen.



E. Schrödinger (1926)

sei $\psi(r, t) = \int f(p) e^{i(pr - Et)/\hbar} dp$ mit $E = \frac{p^2}{2m}$

Es folgt (Zeitableitung): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \int E f(p) e^{i(pr - Et)/\hbar} dp$

und (Gradientenbildung): $\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(r, t) = \int p f(p) e^{i(pr - Et)/\hbar} dp$

$$-\hbar^2 \Delta \psi(r, t) = \int p^2 f(p) e^{i(pr - Et)/\hbar} dp$$

somit $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, t)$ Schrödingergleichung für ein freies Teilchen

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

Formale Zuordnung: $E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
 $p \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ Zuordnung von Operatoren

Formale Regeln für das Aufstellen der Schrödingergleichung (generalisierte Koordinaten und Impulse) werden in der Theorie gegeben.

Wie sieht die Schrödingergleichung für die Bewegung eines Teilchens in einem Potential $V(r)$ aus?

Postulat:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(r, t)$$

kinetische Energie

potentielle Energie

Schrödingergleichung
für ein Teilchen in
einem Potential

Diese Gleichung kann nicht hergeleitet werden, sondern wird postuliert.
Ihre Gültigkeit muss experimentell überprüft werden!

Tatsächlich ist das Postulat korrekt. Die Schrödingergleichung lautet also:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = H \psi(r, t)$$

mit $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$

H ist der Hamiltonoperator (engl. Hamiltonian).

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Hängt H nicht explizit von der Zeit ab (konservatives System), so ist die Gesamtenergie E eine Konstante der Bewegung.

Mit $E = \hbar\omega$ muss $\psi(r, t)$ also die folgende Form haben:

$$\Psi(r, t) = \psi(r) \exp^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Einsetzen liefert die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H\psi_E(r) = E\psi_E(r)$$

$\psi_E(r)$ heisst Eigenfunktion des Operators H .

Zur vollständigen Lösung eines (zeitunabhängigen) physikalischen Problems muss $\psi_E(r)$ die Regularitäts- und Randwertbedingungen erfüllen. Zunächst heisst dies:

- 1) $\psi_E(r)$ muss stetig sein!
- 2) Die erste Ableitung von $\psi_E(r)$ muss stetig sein!

1.3.3. Eindimensionale Quantensysteme

Einleitung

Betrachtung des speziellen Falles der eindimensionalen Bewegung eines Teilchens in einem allgemeinen Potential $V(x)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t)$$

Stationäre Lösungen:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Entsprechendes Eigenwertproblem:

$$H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

Im folgenden benutzte Abkürzung: $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}U(x)$ und $E = \frac{\hbar^2}{2m}\epsilon$

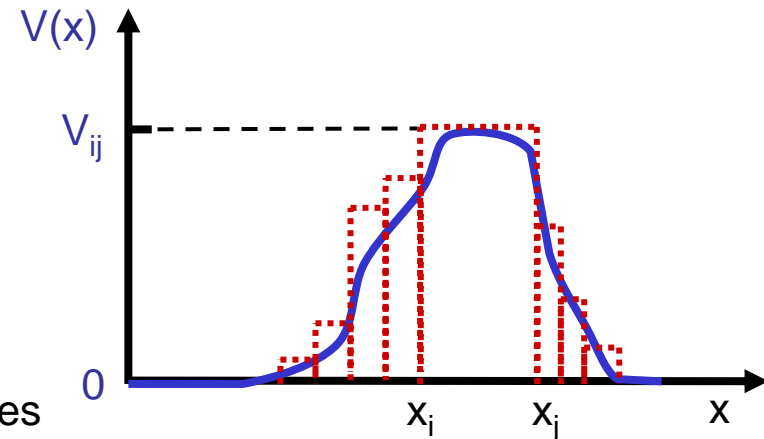
Somit: $\psi'' = (\epsilon - U) \psi$

Allgemeines zu lösendes Eigenwertproblem

Man beschreibt eine beliebige Potentialform $V(x)$ mit Hilfe der Zerlegung in Bereiche konstanten Potentials V_{ij} (Rechteckpotential):

$$V(x) = V_{ij} = \text{const.}$$

$$x_i \leq x \leq x_j$$



Man bestimmt dann die Lösungen für jeweils konstantes Potential unter der Berücksichtigung der Randbedingung:

$$\psi'(x), \psi(x) \text{ stetig für alle } x.$$

Allgemeine Lösungen für ein bestimmtes konstantes V_i , bzw. U_i :

$$1) \quad \epsilon > U_i \quad \psi(x) = e^{\pm ik_i x} \quad k_i = \sqrt{\epsilon - U_i}$$

oszillatorische Lösung

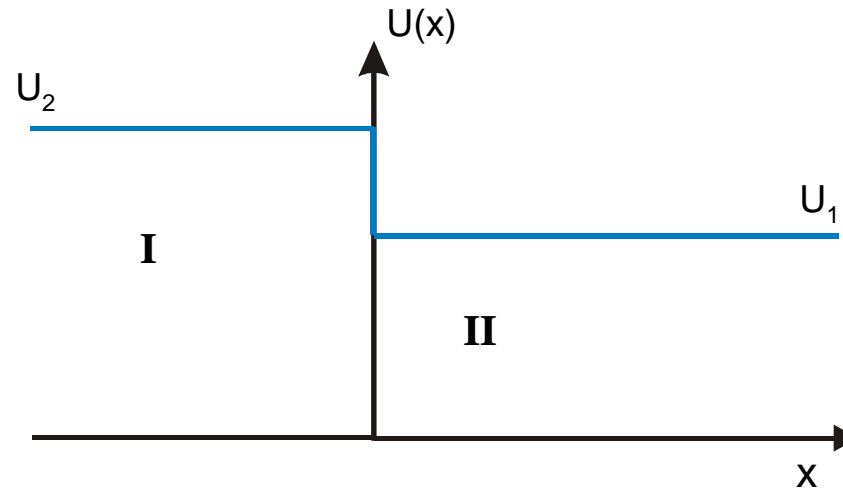
$$2) \quad \epsilon < U_i \quad \psi(x) = e^{\pm \kappa_i x} \quad \kappa_i = \sqrt{U_i - \epsilon}$$

exponentielle Lösung

Die endliche Potentialstufe

Man betrachtet folgende Potentialform:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & x > 0 \\ U_2 & x < 0 \end{cases}$$



$$\text{Fall i) } U_2 > \epsilon > U_1$$

Lösung im Bereich II \rightarrow oszillatorsch

Lösung im Bereich I \rightarrow exponentiell abfallend

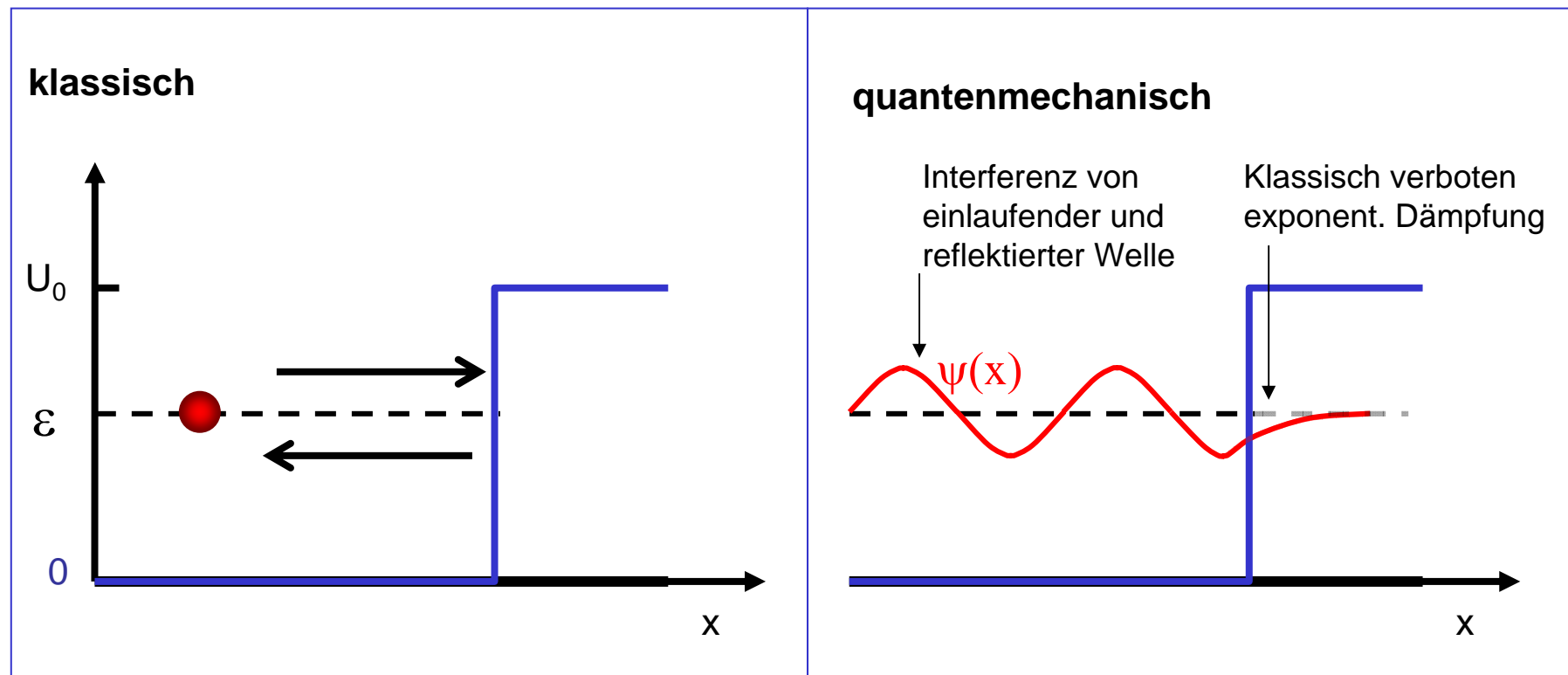
$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \phi) & x > 0 \\ A_2 e^{\kappa_2 x} & x < 0 \end{cases}$$

Die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung y'/y bei $x=0$ liefert:

$$k_1 \cot(\phi) = k_2 \quad \text{somit} \quad \phi = \arctan(k_1/k_2)$$

Die Stetigkeit von $\psi(x)$:

$$\frac{A_2}{A_1} = \sin(\phi) = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}} = \sqrt{\frac{\epsilon - U_1}{U_2 - U_1}}$$



Fall ii) $\epsilon > U_2$

Oszillatorische Lösung im gesamten Raumbereich!

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x} + r e^{ik_1x} & x > 0 \\ t e^{-ik_2x} & x < 0 \end{cases}$$

Einlaufende Welle der Amplitude 1

Amplitudentransmissionskoeffizient (transmittede Welle)

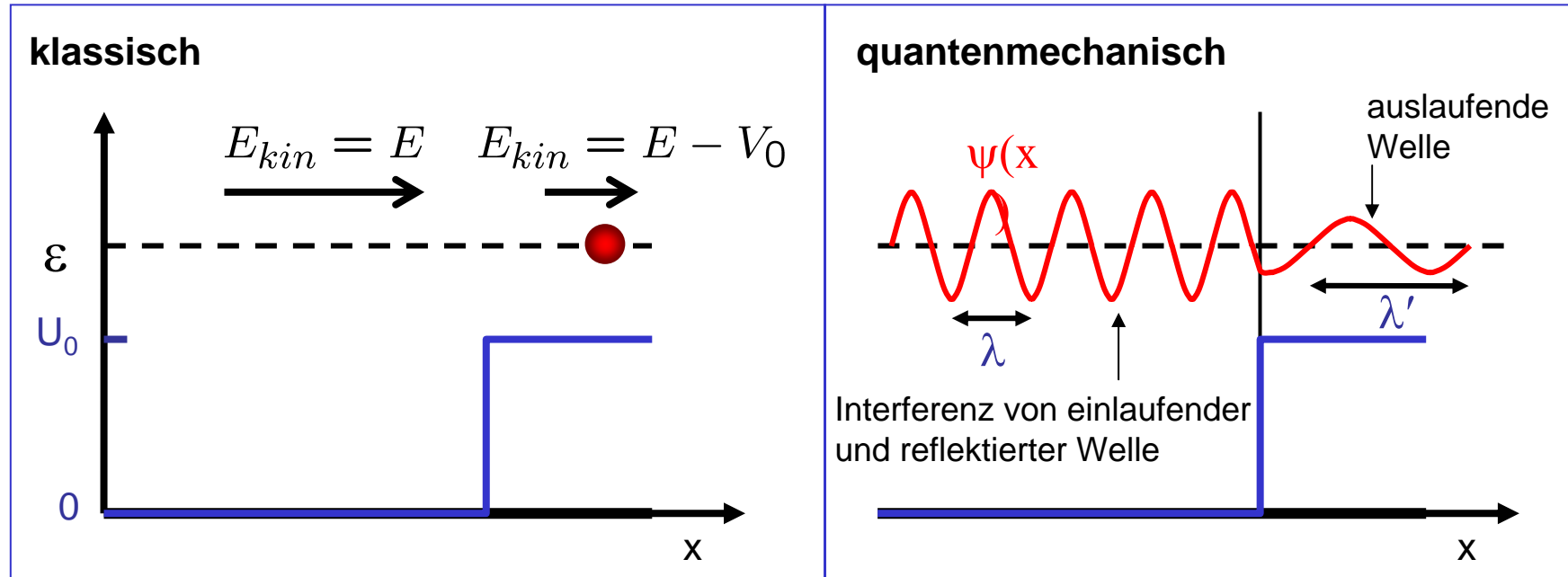
Amplitudenreflexionskoeffizient (reflektierte Welle)

Für die Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten (r bzw. t) folgt aus den Stetigkeitsbedingungen:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$t = 1 + r = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Analogie zur Reflexion und Transmission von Lichtwellen an dielektrischer Grenzfläche (Fresnelkoeffizienten)!



Die Beschreibung der Bewegung eines räumlich lokalisierten Teilchens kann man mit Hilfe eines Wellenpaketes beschreiben:

Unterschiede zur klassischen Physik:

a) Das Wellenpaket kann auch im Fall $U_2 > \epsilon > U_1$ in den (klassisch verbotenen) Bereich II eindringen

b) Das reflektierte Wellenpaket erfährt eine zeitliche Verzögerung (Phasenverschiebung im Fall einer ebenen Welle)

c) Auch für den Fall $\epsilon > U_2$ gibt es eine Reflexion.

Die Reflexionswahrscheinlichkeit R und die Transmissionswahrscheinlichkeit T sind dabei:

$$R = |r|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} |t|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Animationen für die Bewegung von Wellenpaketen:

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/>

Der unendlich hohe Potentialtopf

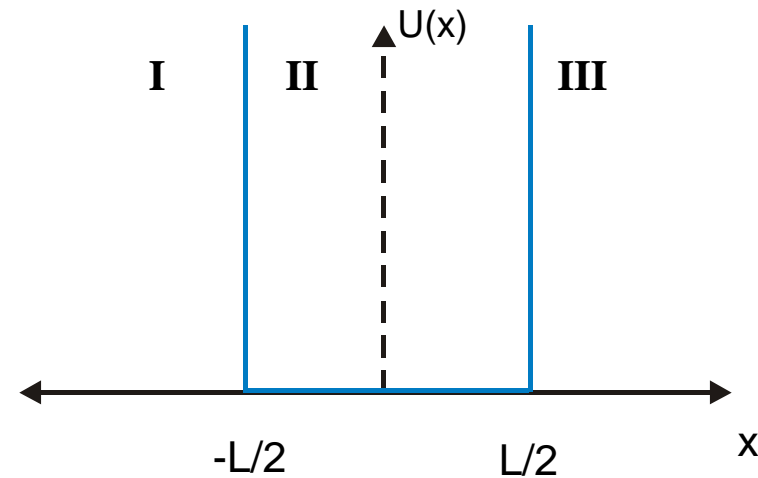
Man betrachtet folgende Potentialform:

Die Wellenfunktion verschwindet in den Bereichen I und III.

Im Bereich II existieren oszillatorische Lösungen der Form:

$$\psi_n(x) = \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n \text{ ungerade}$$

$$\psi_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n \text{ gerade}$$



Die Eigenfunktionen haben eine bestimmte Parität: $\psi_n(x) = \pm\psi_n(-x)$

(Invarianz von $U(x)$ bei Spiegelung!)

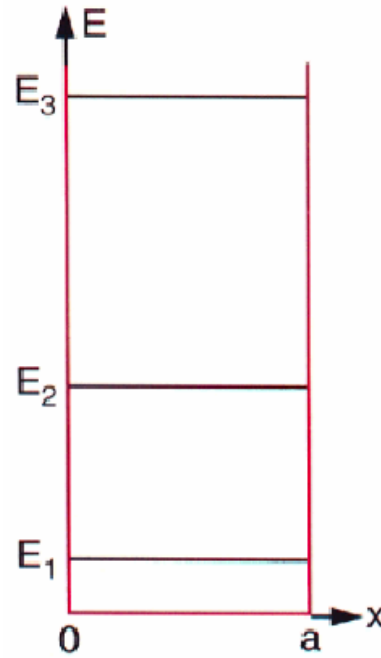
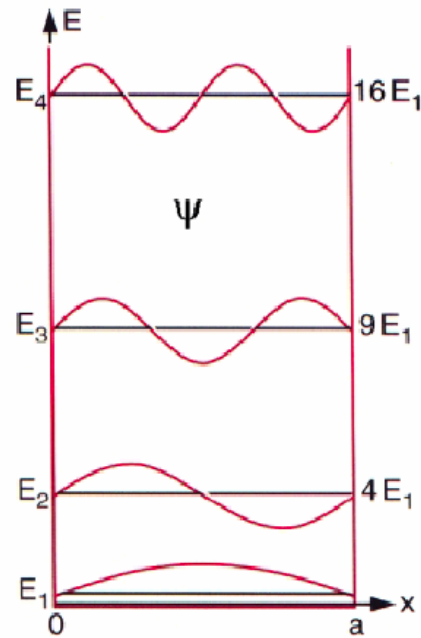
Die zugehörigen Eigenenergien sind:

$$\epsilon_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad \text{bzw.} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{L^2}$$

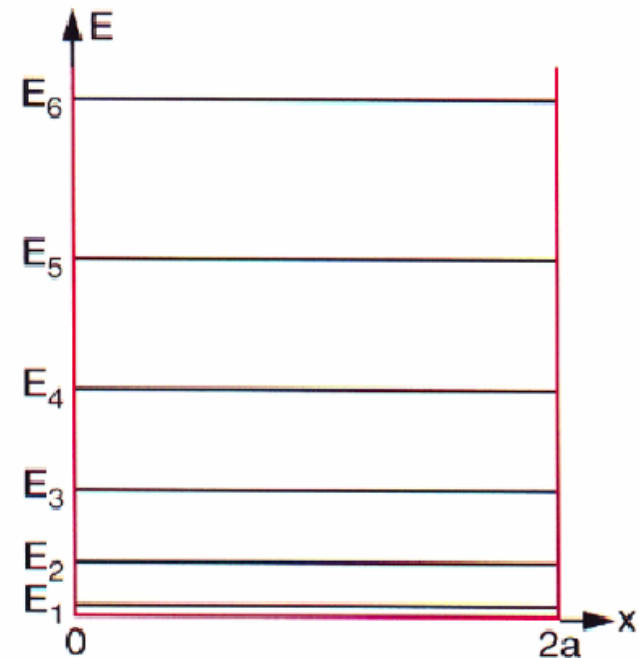
$$n = 1, 2, 3, \dots$$

quadratische n-Abhängigkeit!

Eigenfunktionen und Eigenniveaus im unendlich hohen Potentialtopf



schmaler Kasten



breiter Kasten

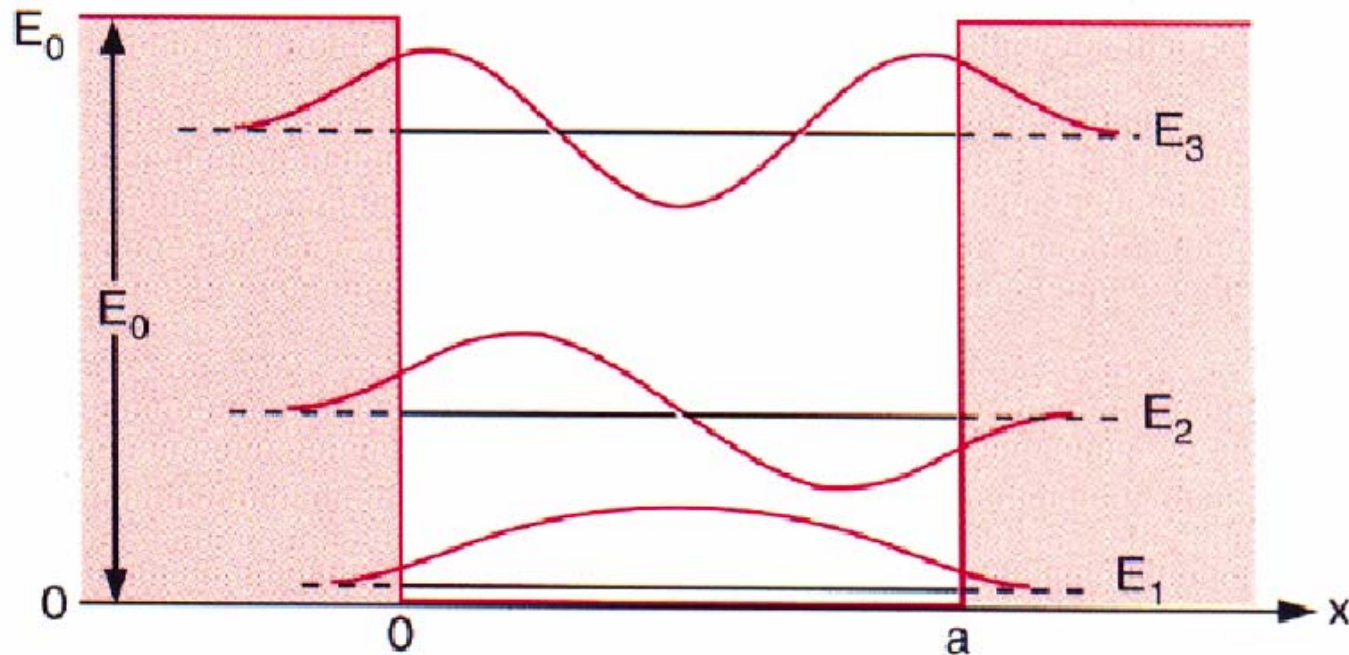
$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m L^2}$$

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

quadratische n-Abhängigkeit!

Der endlich tiefe Potentialtopf

Eigenenergien und Eigenfunktionen des endlich tiefen Potentialtopfes.



Da die Eigenfunktionen in den klassisch verbotenen Bereich eindringen, ergibt sich effektiv ein breiterer Potentialtopf und damit eine Absenkung der Eigenenergien im Vergleich zum unendlich hohen Potentialtopf.

Der harmonische Oszillator

Das harmonische Potential hat die Form:

$$U(x) = 1/2 m \omega^2 x^2$$

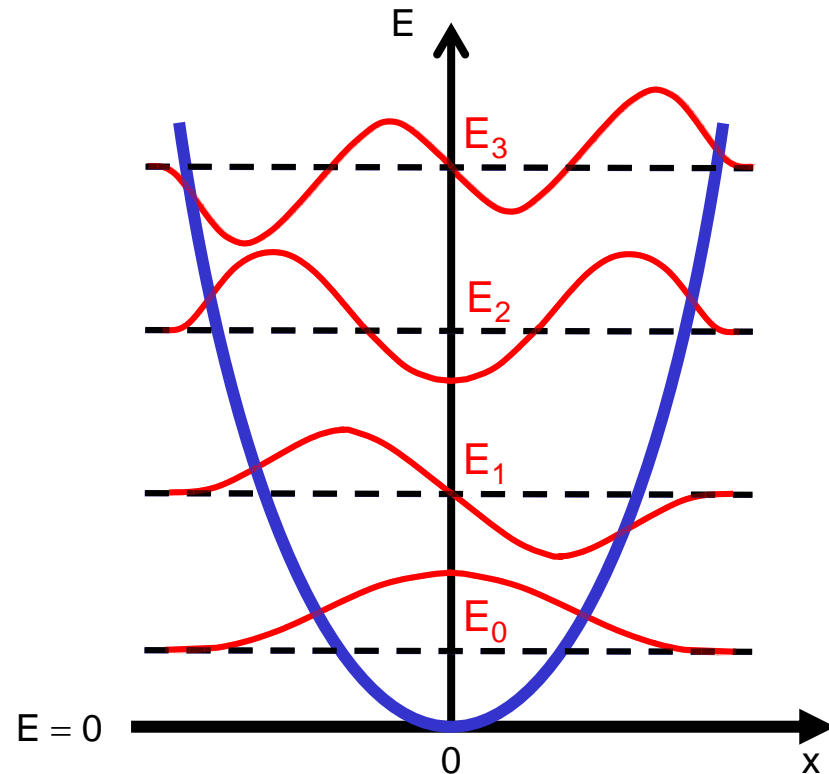
Die Eigenenergien des harmonischen Oszillators sind (Details in Theorie):

$$E_n = (1/2 + n) \hbar \omega$$

Nullpunktsenergie

lineare n-Abhängigkeit

Die Energieniveaus sind äquidistant!



Die Eigenfunktionen sind $\psi_n(x)$ Hermite-Polynome:

$$\psi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! a}} e^{-x^2/2a^2} H_n(x/a)$$

$$a = \sqrt{\hbar / (m\omega)}$$

Experimentelle Realisierung von Potentialtöpfen, -wällen, ...

Niedrigdimensionale Quantensysteme sind keine rein akademischen Beispiele.

- 1) Reduktion der Dimensionalität durch Symmetrieeigenschaften (Separierung der Wellenfunktion)
- 2) Reale niedrigdimensionale Systeme in künstlichen Mikro- und Nanostrukturen

Beispiele: Einschränkung der Bewegung von Elektronen auf

Zwei Dimensionen ➡ Quantenfilm (Quantum Well)

Eine Dimension ➡ Quantendraht (Quantum Wire)

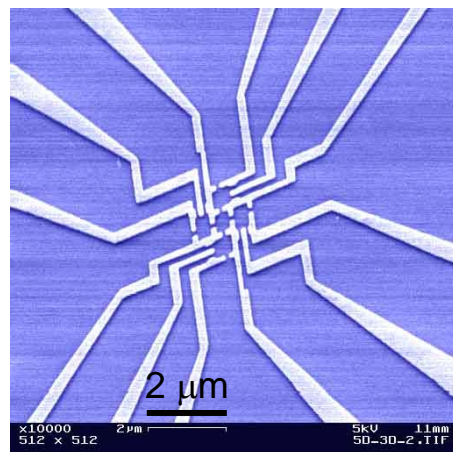
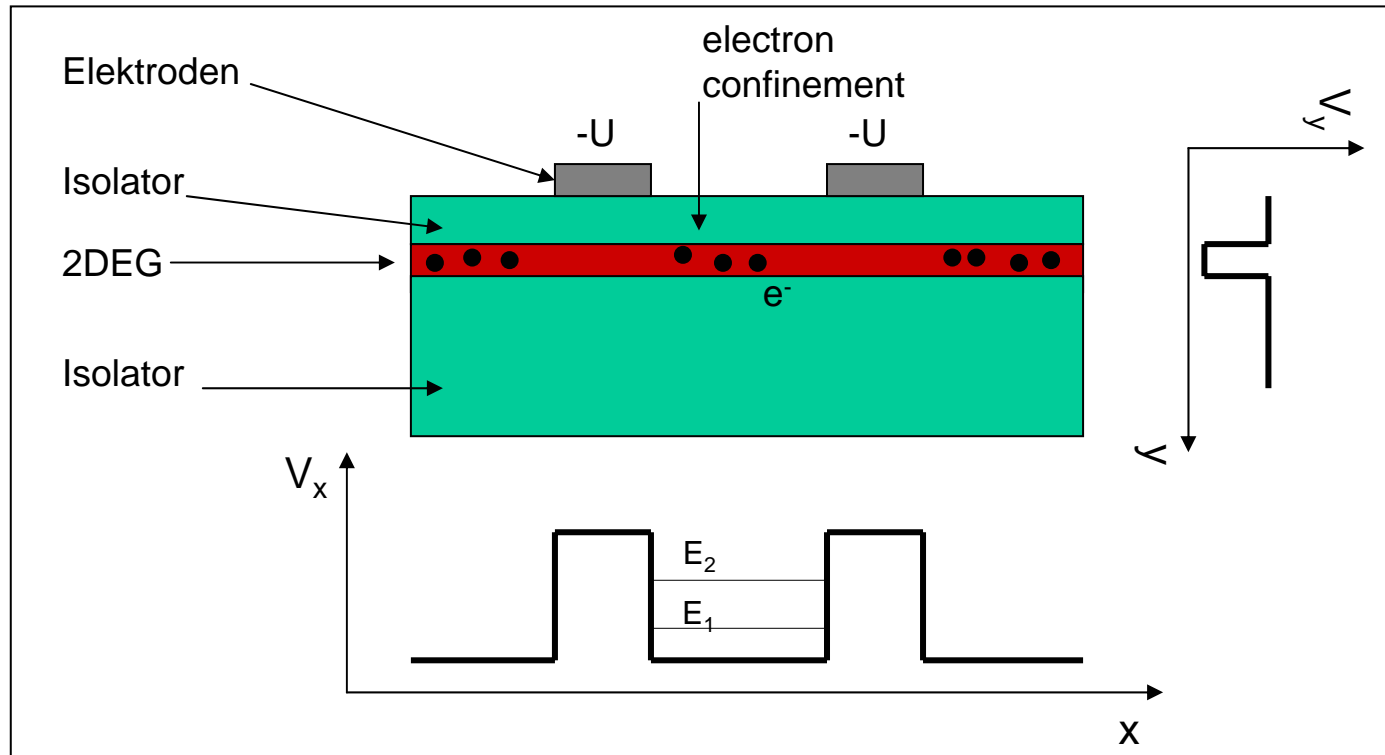
Null Dimensionen ➡ Quantenpunkt (Quantum Dot)

a) Elektrostatische Quantenpunkte

Prinzip: Herstellung einer dünnen leitenden Schicht (z.B. durch epitaktisches Wachstum), in der sich Ladungsträger (meist Elektronen) bewegen können

➡ Zweidimensionales Elektronengas (2DED)

Erzeugung von elektrostatisch definierten Quantenpunkten

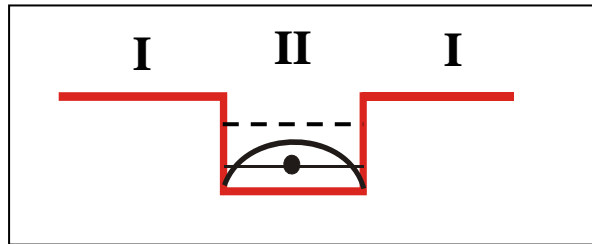


SEM-Bild einer Elektrodenstruktur auf einem 2DEG. Die Struktur erzeugt 5 gekoppelte Quantenpunkte. [R. Blick, homepage CENS, München]

b) Nanokristalle

Quantenpunkte können auch chemisch (z.B. in Lösung) synthetisiert werden. Man bezeichnet sie dann meist als Nanokristalle.

Durch Wahl des Materials (CdSe, CdTe, InP, etc.) und der Größe der Quantenpunkte (2-10 nm) kann ihr Fluoreszenzmaximum eingestellt werden.



Potentialtopf für Elektronen in einem Nanokristall

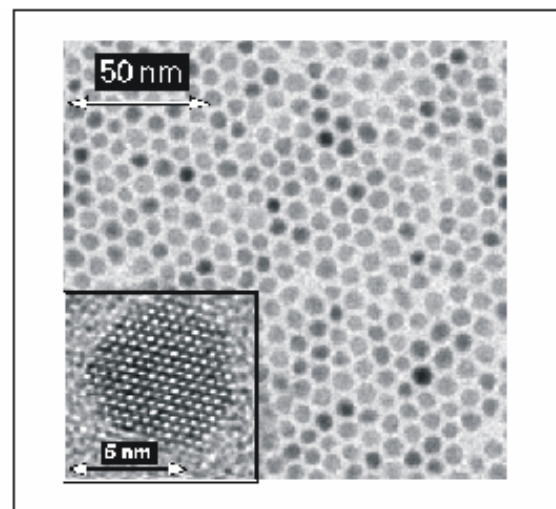
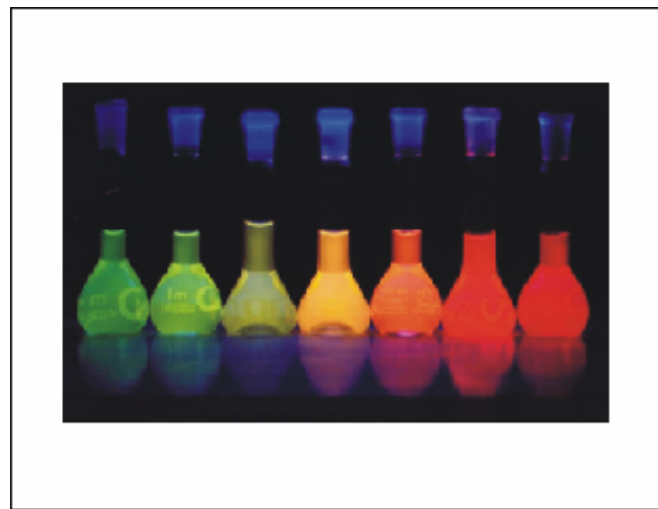
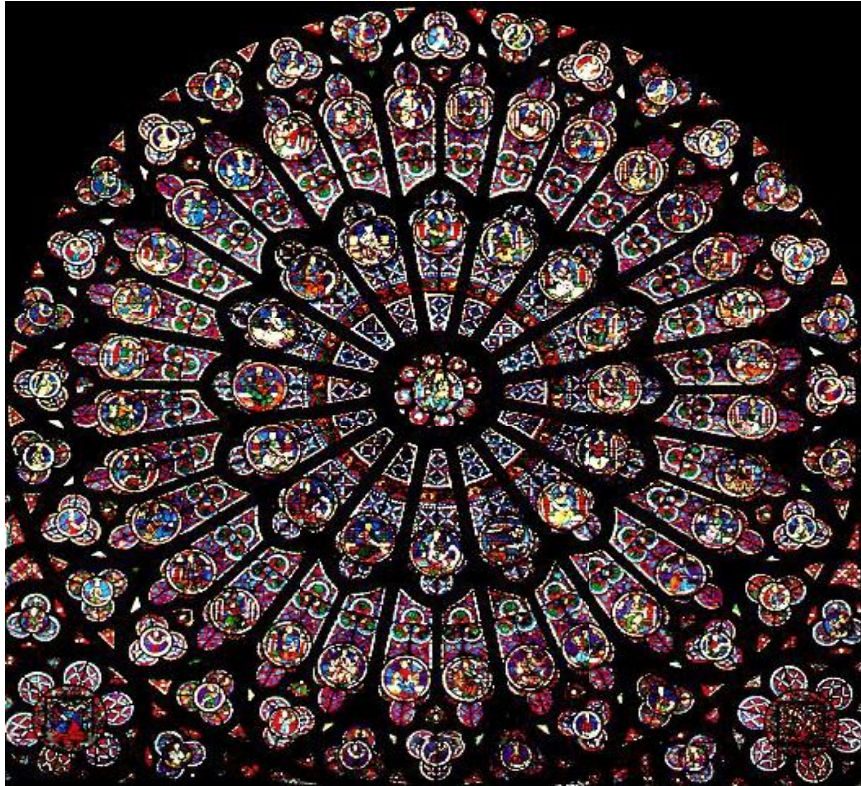


Foto von [AG H. Weller, Univ. Hamburg]

Anwendungen: z.B. als stabile Fluoreszenzmarker in der Mikroskopie

Die chemische Synthese von Quantenpunkten (Metall- oder Halbleiternanokristallen) wird seit Jahrhunderten bei der Produktion von Farbgläsern genutzt.



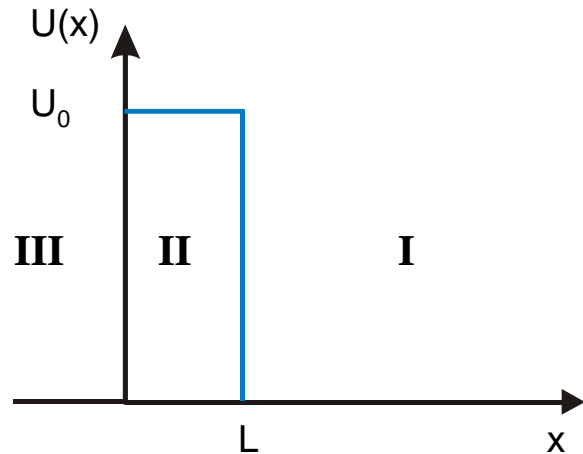
Die verschiedenen Farben sind ein Quanteneffekt!

Notre Dame, nördliches Rosenfenster, 1250-1260

1.3.3. Der Tunneleffekt

Die Tunnelbarriere

Ein sehr wichtiges Beispiel eines Rechteckpotentials ist der Potentialwall:



$$U(x) = \begin{cases} 0 & x > L \\ U_0 & 0 < x < L \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

Für die beiden Fälle $\epsilon > U_0$ und $\epsilon < U_0$ lässt sich ein Transmissionskoeffizient T durch die Barriere angeben:

$$T = \frac{4\epsilon(\epsilon - U_0)}{4\epsilon(\epsilon - U_0) + U_0^2 \sin^2(kL)} \quad \epsilon > U_0 \quad k = \sqrt{U_0 - \epsilon}$$

$$T = \frac{4\epsilon(U_0 - \epsilon)}{4\epsilon(U_0 - \epsilon) + U_0^2 \sinh^2(\kappa L)} \quad \epsilon < U_0 \quad \kappa = \sqrt{\epsilon - U_0}$$

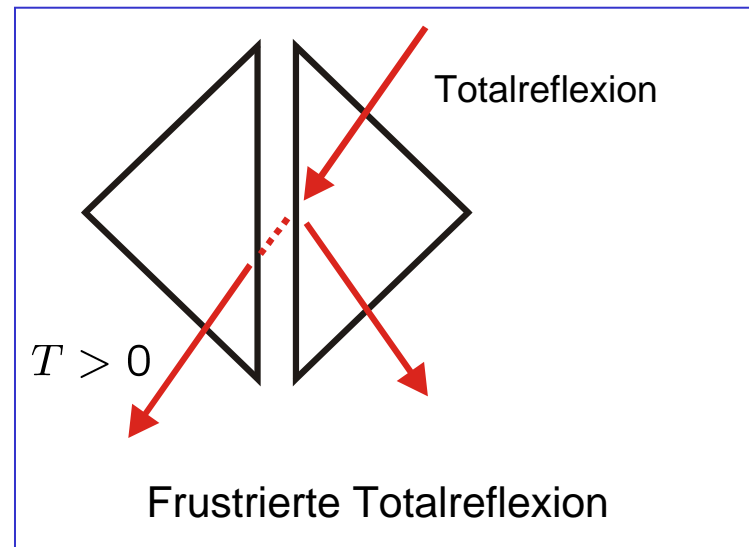
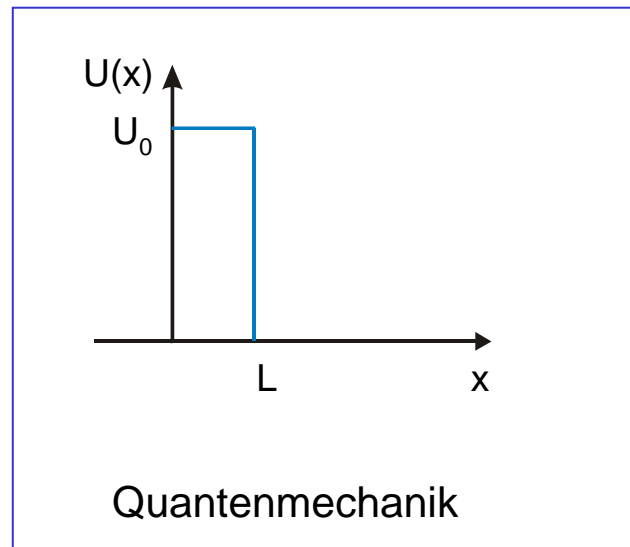
Wie in den anderen Beispielen für Rechteckpotentiale verhält sich die Wellenfunktion

exponentiell $\psi(x) \approx Ae^{\kappa x} + r + Be^{-\kappa x} \quad \epsilon > U_0$

oszillatorisch $\psi(x) \approx Ce^{ikx} + r + De^{-ikx} \quad \epsilon > U_0$

Im Gegensatz zum klassischen Fall ist $T \neq 0$ auch wenn $\epsilon < U_0$!!

Das Teilchen kann durch die Barriere tunneln. \rightarrow Tunneleffekt

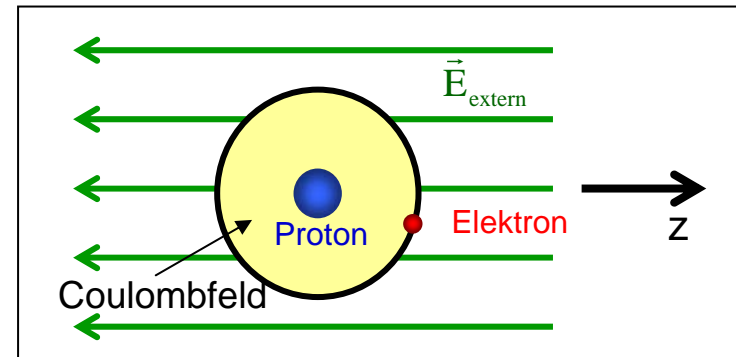
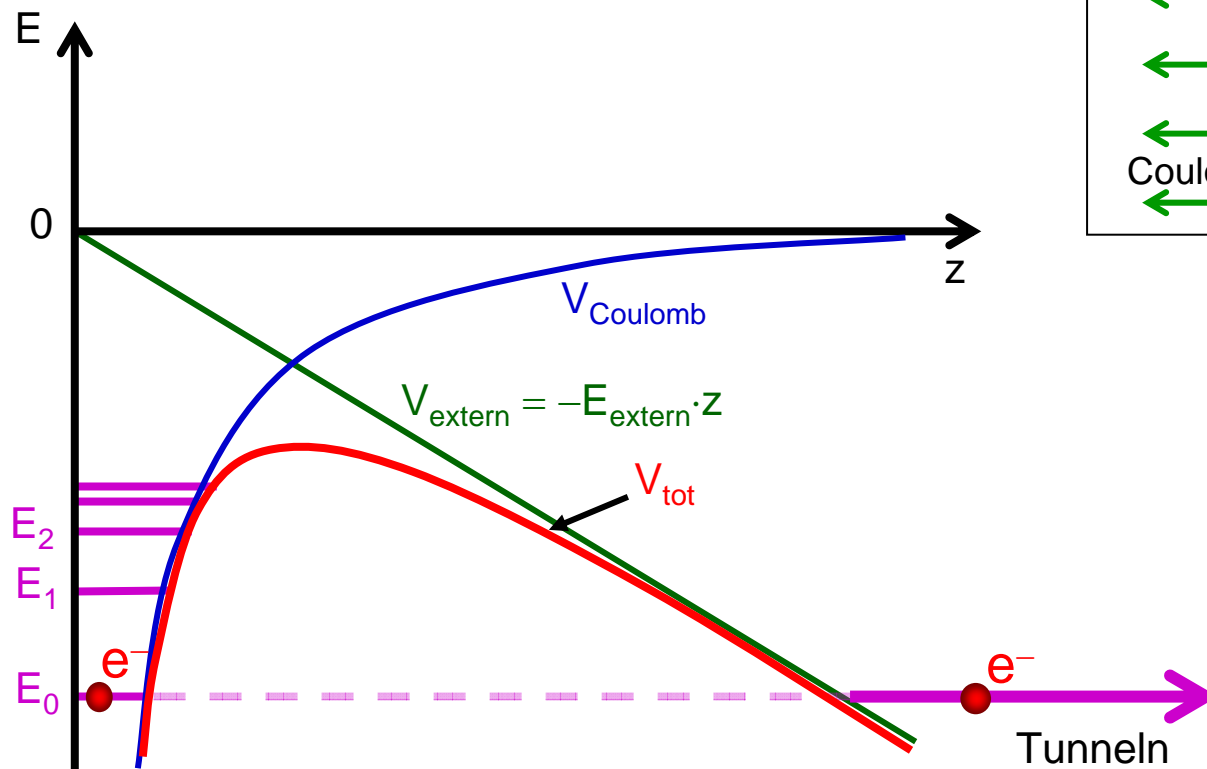


Die Tunnelionisation

Atome (z.B. hochangeregte Rydberg-Atome) können leicht durch ein externes statisches elektrisches Feld ionisiert werden.

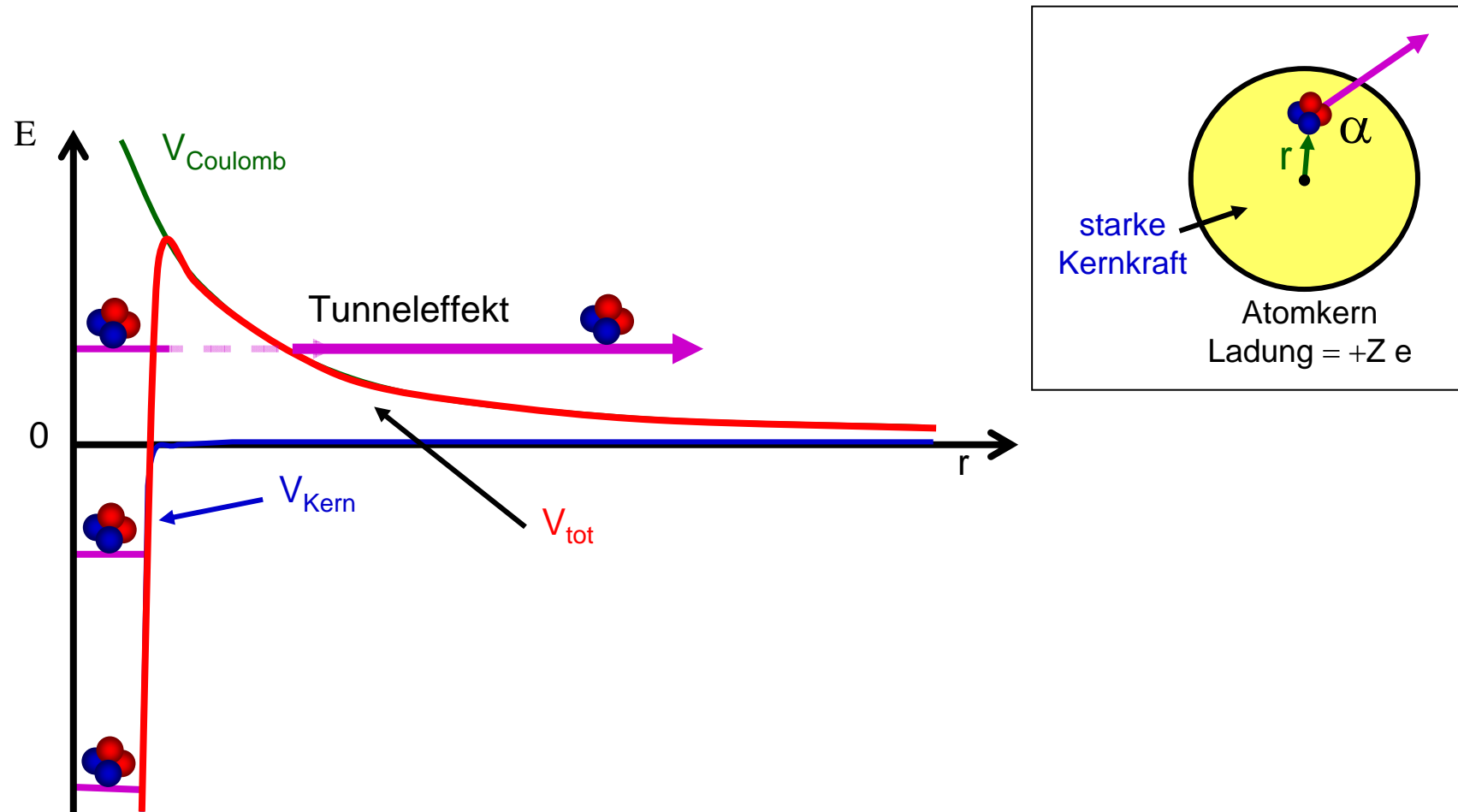
Dabei tunnelt das Elektron durch die aus äußerem und innerem Feld entstehende Potentialbarriere.

→ Sequentielles, zustandsselektives Ionisieren



Der α -Zerfall

Beim α -Zerfalls ergibt sich das Gesamtpotential aus der sehr kurzreichweitigen attraktiven Kernkraft und der repulsiven Coulombkraft zwischen den positiv geladenen α -Teilchen, d.h He-Kernen (Rutherford 1908).



Das Tunnelmikroskop

Eine der wichtigsten direkten Anwendungen des Tunneleffektes ist das Tunnelmikroskop.

➔ Nobelpreis 1986

Prinzip:

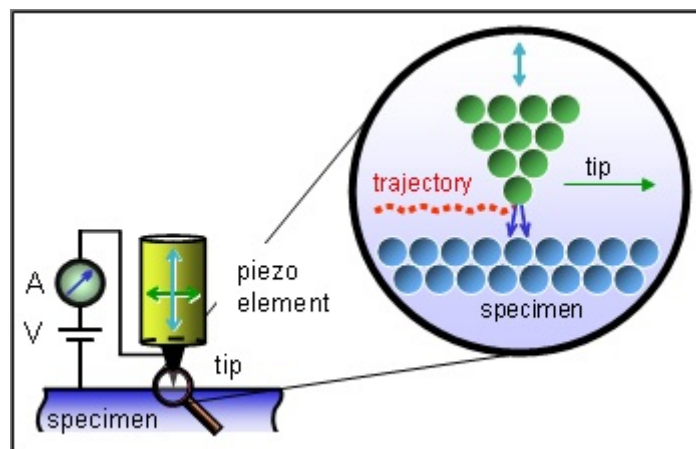
- 1) Elektronen tunneln durch Vakuum zwischen kleiner Spitze und leitender Fläche
- 2) Hohe Sensitivität des Tunnelstroms auf den Abstand
- 3) Bildgebung durch Abrasterung einer Probe



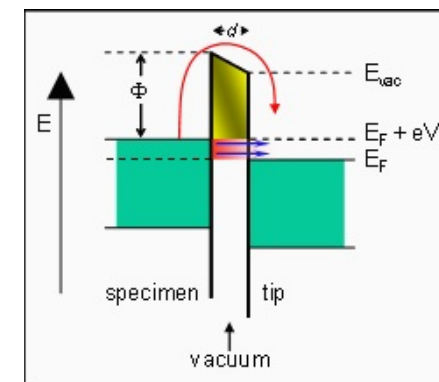
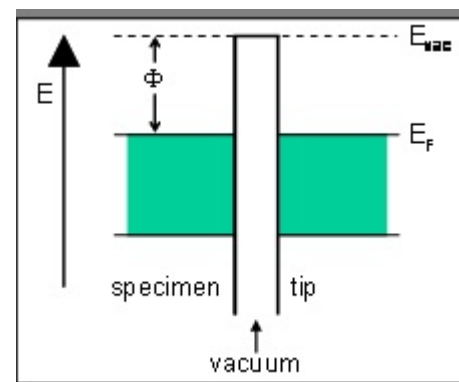
G. Binnig



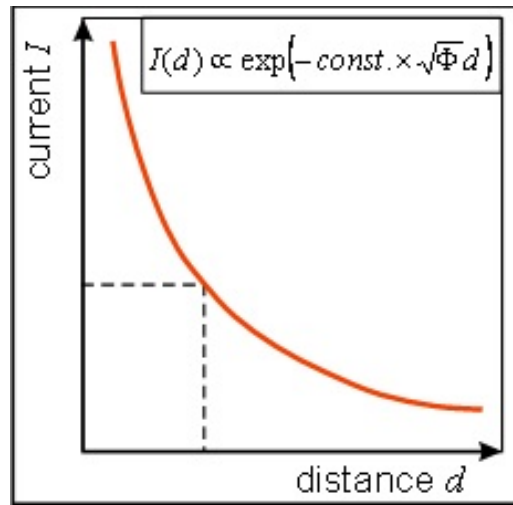
H. Rohrer



Prinzipieller Aufbau eines STM (scanning tunneling microscope) [Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]



Energiebänder für Spitze und Probe ohne (links) und mit (rechts) angelegter Spannung [Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]

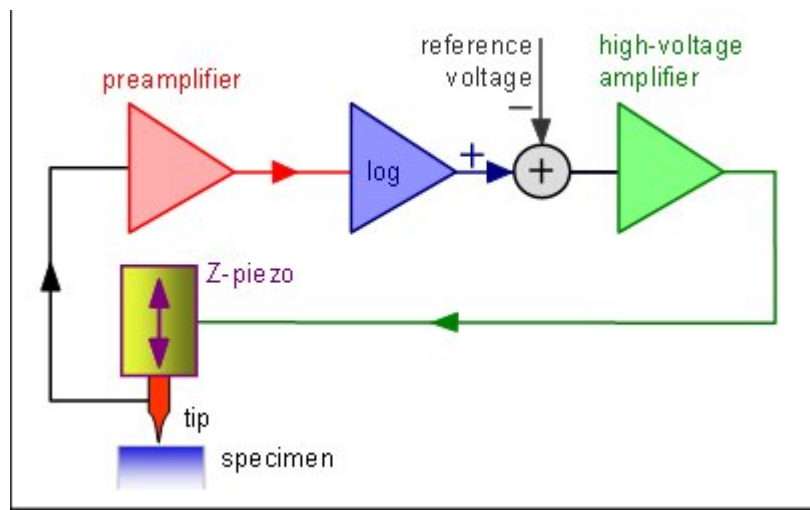


Der Tunnelstrom folgt der Abhängigkeit:

$$I_T(d) \propto eV \exp\left(-2\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}d\right)$$

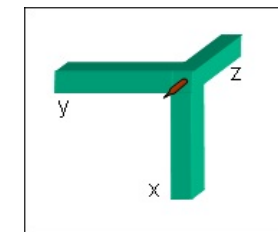
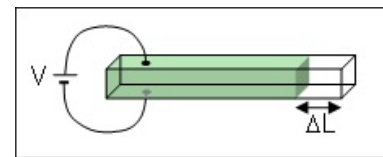
Bei einem typischen Wert von $V=4eV$ folgt eine Erhöhung des Tunnelstroms um einen Faktor *1000* bei einer Abstandsänderung von nur *0.3 nm*! Dies macht STM so empfindlich!

Strom-Abstands-Kennlinie



Feedback-Loop im STM

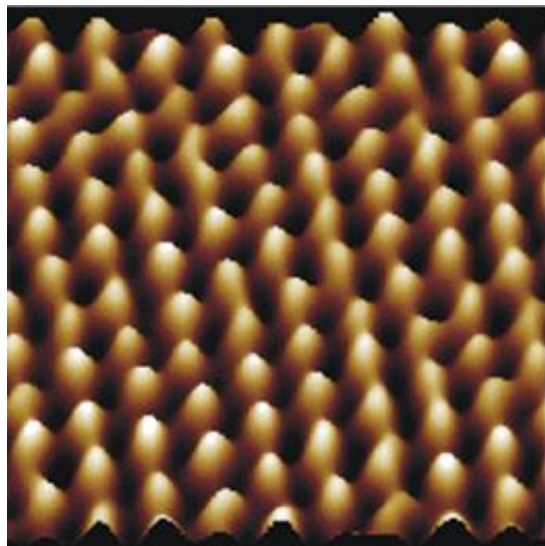
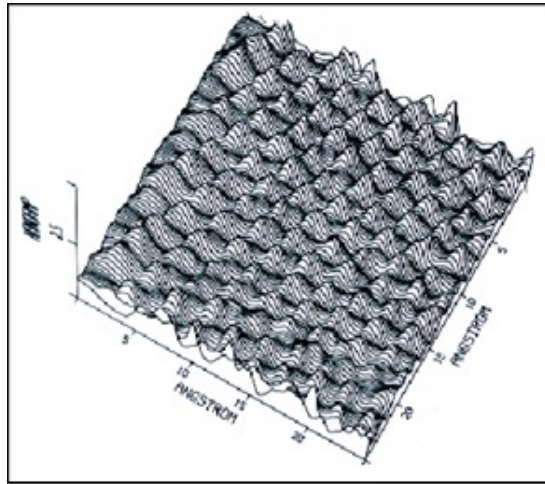
STM erfordert eine genaue Positionierung der STM-Spitze (Å-Präzision). Zu diesem Zweck werden piezoelektrische Elemente eingesetzt.



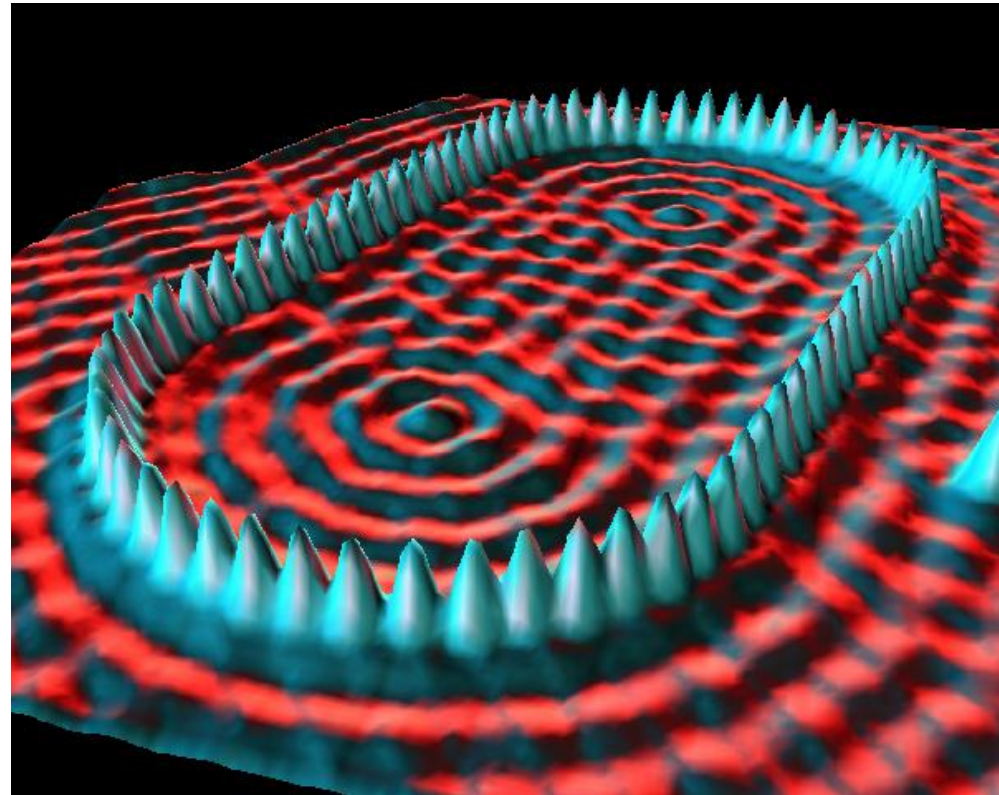
Piezoelektrika: Prinzip und 3D-Scanner

[alle Bilder: Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]

Beispiel einiger STM Bilder:



Linescan und Bild von Graphit
[Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]



Atomic Corral [IBM Gallery]