

3. Atomphysik

Prof. David Hunger

Physikalisches Institut, KIT Fakultät für Physik

3.5 Anwendungen der Schrödinger Gleichung

Wiederholung Schrödingergleichung

Stationäre Schrödingergleichung für ein Teilchen im Potential $V(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi$$

Zeitabhängige Schrödingergleichung

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

Mit Impulsoperator: $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)\right)\psi$

Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

■ Teilchen im Potentialkasten

$$V(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = \infty \quad x < 0, x > a$$

■ Ansatz

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

■ Bestimme A, B aus Randbedingungen

$$\psi(0) = 0 \rightarrow A = -B$$

$$\psi(L) = 0 \rightarrow A(e^{ika} - e^{-ika}) = 0$$

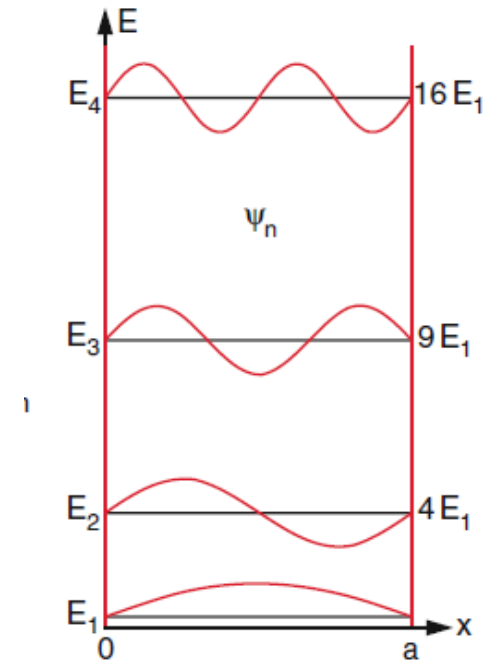
$$\rightarrow 2i A \sin(ka) = 0 \rightarrow kL = n\pi, k_n = \frac{n\pi}{a} \text{ mit } n = 1, 2, \dots \infty$$

■ diskrete Impulswerte

$$p_n = \hbar k_n$$

■ Diskrete Energien

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2};$$



Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

- minimale Energie $\neq 0$ $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$ Nullpunktsenergie
- Je größer a , desto kleiner $E_1 \rightarrow$ konsistent mit Heisenbergscher Unschärferelation

- Zugehörige Wellenfunktionen

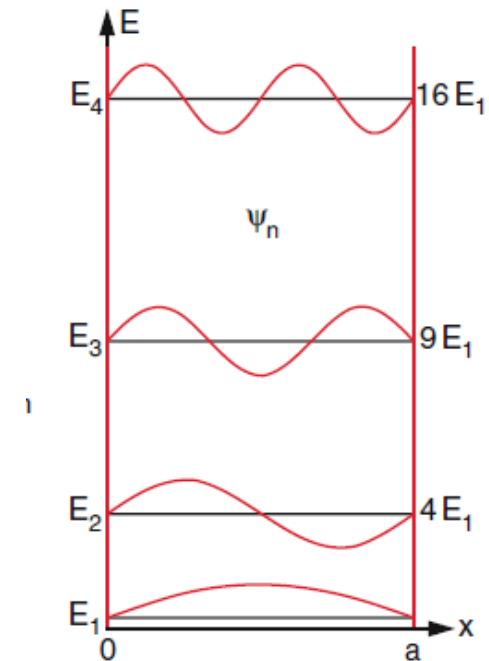
$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$$

- Normierung $\int \psi^* \psi = 1$

$$\rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

- Anmerkung: ψ_n hier reell, die vollständigen Wellenfunktionen sind aber komplexwertig:

$$\Psi(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\omega t}$$



Potentialtopf in 3D

- Dreidimensionales Kastenpotential

$$V(x) = 0 \quad \text{für} \quad 0 \leq x \leq a_x, 0 \leq y \leq a_y, 0 \leq z \leq a_z$$

- Produktansatz $\psi(\vec{r}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$
- Lösung durch Separation der Variablen $\rightarrow$ drei Differentialgleichungen mit Lösungen wie vorher in 1D

$$\psi(\vec{r}) = A \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z)$$

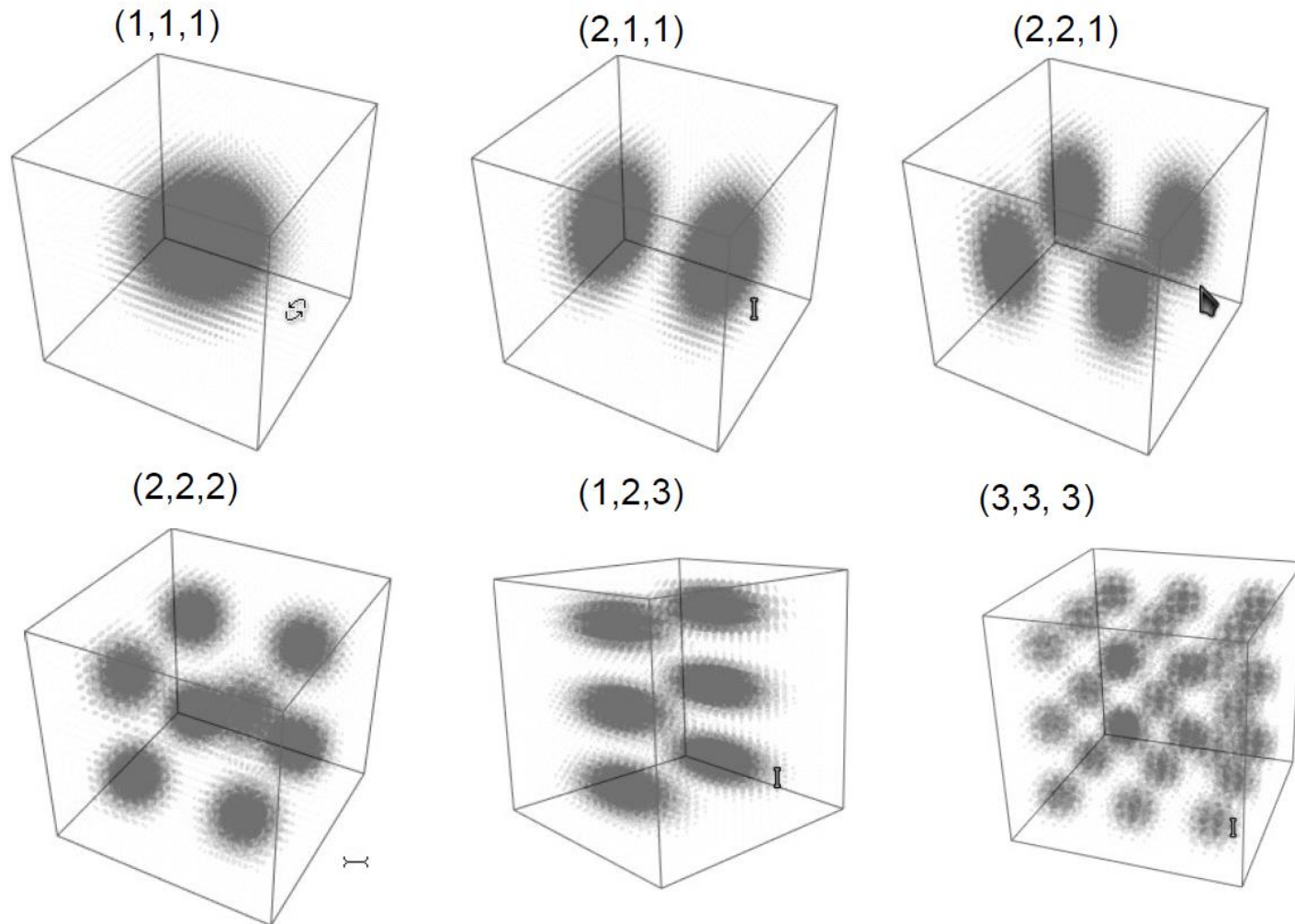
$$\text{mit } k_{\{x,y,z\}} = n_{\{x,y,z\}} \pi / a_{\{x,y,z\}}$$

$\rightarrow$ eine Quantenzahl pro Raumdimension!

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}, \quad E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x}{a_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{a_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{a_z} \right)^2 \right)$$

- Zustände mit gleicher Energie bei unterschiedlichen Quantenzahlen heißen „entartete Zustände“

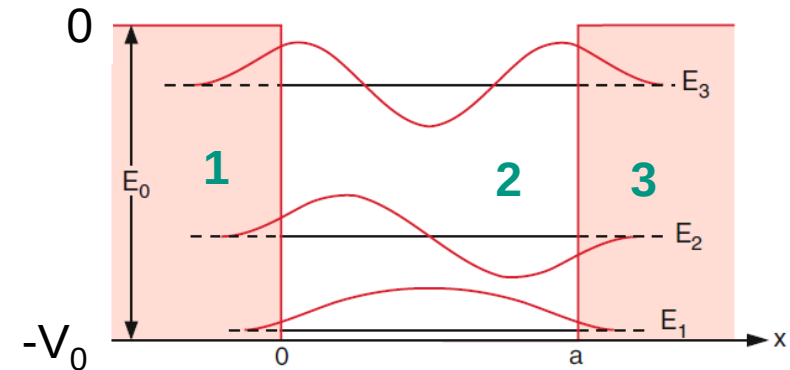
Potentialtopf 3D - Aufenthaltswahrscheinlichkeit



Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

$$V(x) = -V_0 \quad \text{für } 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{für } x < 0 \text{ und } x > a$$



Schrödingergleichung in Bereichen (1), (2), (3)

(1) und (3) $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \text{mit } E < 0 \rightarrow \text{gebundene Zustände}$

(2) $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = (E + V_0)\psi(x)$

Abkürzende Schreibweise

(1) und (3) $\psi'' = \kappa^2 \psi \quad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$

(3) $\psi'' = -q^2 \psi \quad q^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$

Endlicher Potentialtopf

- ψ muss an allen Orten stetig und stetig differenzierbar sein (ψ und ψ' stetig)
- ψ muss eindeutig und endlich sein
- ψ muss für $x \rightarrow \pm\infty$ schnell genug abfallen so dass
- $\int |\psi|^2 dx = 1$

Gebiete (1), (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz: $\psi(x) = C e^{-\kappa x}, x > a$
 $\psi(x) = D e^{\kappa x}, x < 0$

Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich exponentiell gedämpft

Gebiet (2): $\psi'' = q^2 \psi$

Ansatz $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

Endlicher Potentialtopf

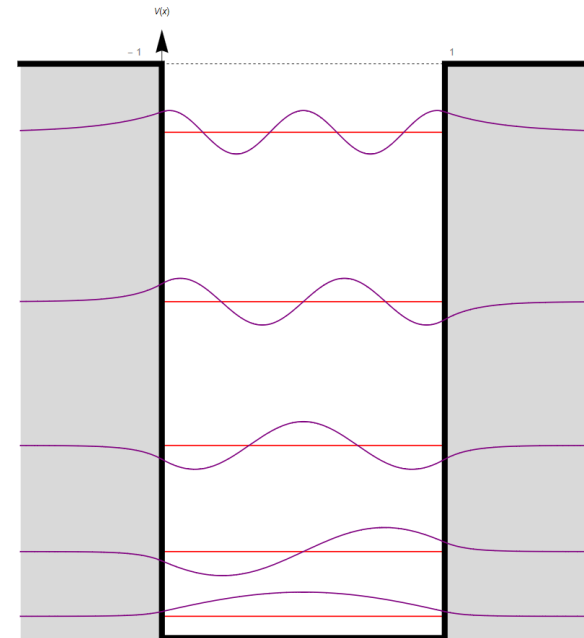
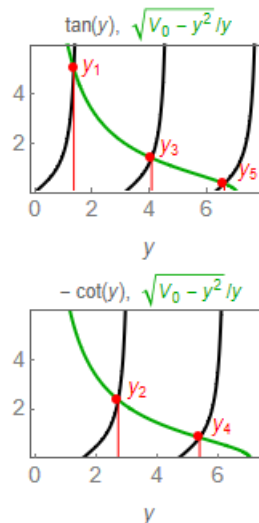
Bedingungen zur Bestimmung der Parameter A,B,C und der Energie E

- Stetigkeit: $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0); \psi_2(x=a) = \psi_3(x=a)$
- Stetige Ableitungen: $\psi'_1(x=0) = \psi'_2(x=0); \psi'_2(x=a) = \psi'_3(x=a)$
- Normierbarkeit $\int |\psi|^2 dx = 1$
- → lösbares Gleichungssystem, führt zu transzendenten Gleichungen

$$q \tan\left(q \frac{a}{2}\right) = \kappa$$

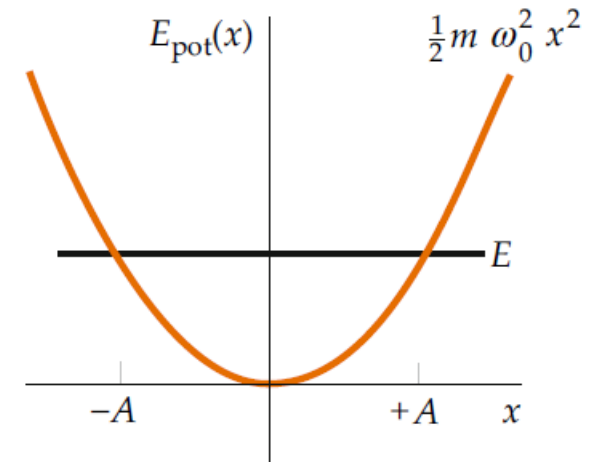
$$-q \cot\left(k \frac{a}{2}\right) = \kappa$$

- Graphische Lösung



Der Harmonische Oszillator

- Klassische Mechanik: Prototyp für Schwingung
- Quantenphysik: Wichtig zur Beschreibung gebundener Zustände, quantisierte elektromagnetische Strahlung etc.



- Hooke'sches Gesetz $F = -Dx$

- Potential
$$V(x) = \int_x^0 -Dx \, dx = \frac{1}{2} Dx^2$$

- Lösung: harmonische Schwingung mit $\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$

- Klassische Gesamtenergie
$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

- Hamilton Operator
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Der Harmonische Oszillator

■ Variablentransformation zur Vereinfachung

$$y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} y^2$$

■ Schrödinger Gleichung $\left(-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar\omega}{2}\right) \psi(y) = E \psi(y)$

$$\text{mit } C := \frac{2E}{\hbar\omega} \rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + (C - y^2)\right) \psi(y) = 0$$

$$\rightarrow \psi'' + (C - y^2)\psi = 0$$

■ 1. Ansatz: $\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$,

$$\psi' = -yA \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right), \quad \psi'' = -A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\rightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$

Der harmonische Oszillator

2. Ansatz: $\psi(y) = A(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$$\psi' = A' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - Ay \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi'' = A'' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - 2A'y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + A(y^2 - 1) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

- Neue DGL für Koeffizienten – Hermite'sche DGL

- Lösung durch Potenzreihenansatz

$$H_n(y) = \sum_i^n a_i y^i \quad \text{Hermite'sche Polynome vom Grad } n$$

- Bestimmungsgleichung

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(y) = H_n(y) e^{-y^2/2}$$

- Für Normierbarkeit muss Potenzreihe endlich sein $\rightarrow n = 1/2(C - 1)$

- Mit $C = 2E/\hbar\omega$ folgen die Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

äquidistante Energiewerte

Nullpunktsenergie $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$

Der Harmonische Oszillator

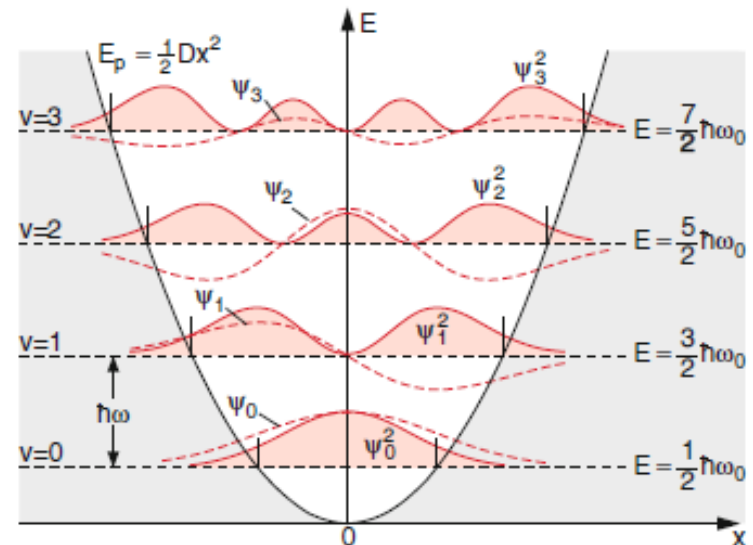
Hermite Polynome

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = -2y$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2$$

$$\psi_n(x) = H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$



Grundzustand und Unschärfe

- Lokalisierung des Grundzustands Δx
- Heisenbergsche Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \hbar$
- Daraus folgt Impulsunschärfe $\Delta p \geq \frac{\hbar}{x}$
- Harmonischer Oszillator: $|\psi|^2 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)$
- Varianz der Gaußverteilung: $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$
- Varianz der Impulsverteilung $(\Delta p)^2 = \frac{1}{2} \hbar m \omega$

$$\rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

H.O. erfüllt die Unschärferelation exakt

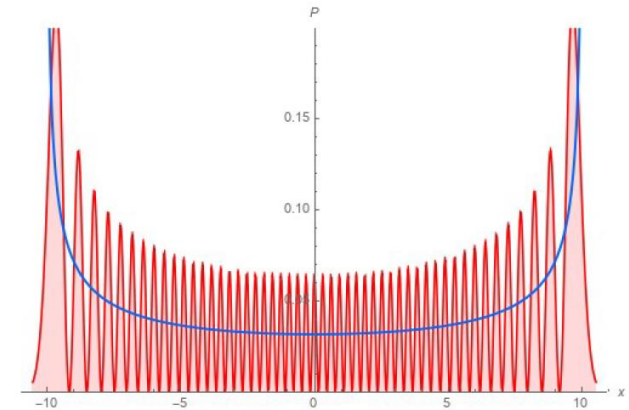
Anmerkung: oft findet sich auch $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
Hängt ab von der Definition von $\Delta x, \Delta p$ - $\frac{1}{e}$ vs $\frac{1}{e^2}$ Breite

Harmonischer Oszillator: QM vs Klassisch

- Vergleiche mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit
- Mit welcher Wkt befindet sich ein Oszillator mit Periode T am Ort x ?

$$w(x) \propto \frac{1}{v(x)T}$$

Für große n nähern sich QM und
klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit an
→ Bohr'sches Korrespondenzprinzip



Quasi-klassische Oszillation: Kohärente Zustände

- Überlagerung von Energieeigenzuständen mit Poisson-verteilten Koeffizienten
- $|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad |c_n|^2 = e^{-\alpha^2/2} \frac{\alpha^{2n}}{n!}$
- „verschobener Grundzustand“



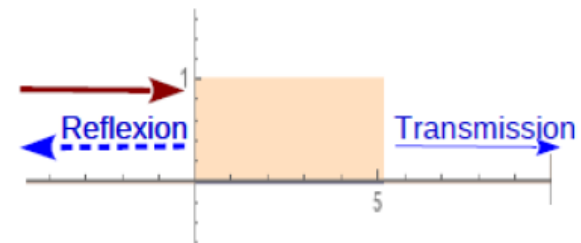
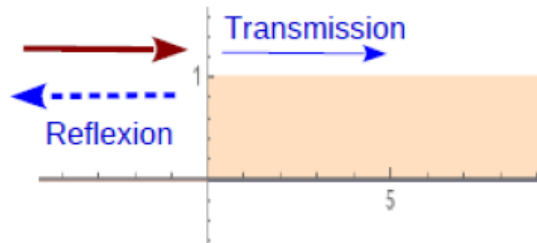
Ebene Welle und Teilchenstrom

- Konstanter Teilchenstrom $\vec{j}$ durch komplexe ebene Welle beschrieben

$$\Psi = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$$

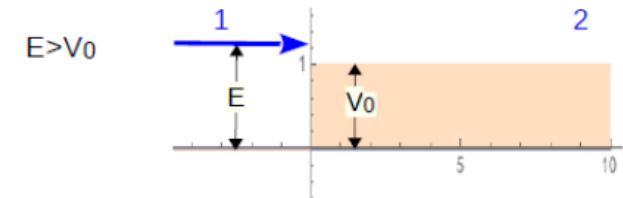
$$\text{Es gilt } \vec{j} = \rho \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot |A|^2 \quad \text{mit } \rho = |A|^2, \vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

- Betrachte Streuung eines Teilchenstrahls an Potentialstufe oder -wall



Teilchenstrom an Potentialstufe

$$V(x) = V_0 \Theta(x) = 0: x < 0; = V_0 \quad x > 0$$



SG für Gebiet 1

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

SG für Gebiet 2

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = (E - V_0) \psi(x)$$

$$\psi'' = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \psi := -q^2 \psi$$

Ansatz

$$\psi_1 = A \exp(ikx) + R \exp(-ikx)$$

einfallend reflektiert

$$\psi_2 = AT \exp(iqx)$$

Transmittiert

Teilchenstrom an Potentialstufe

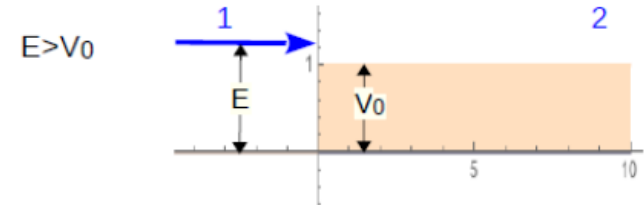
Stetigkeit von ψ, ψ' bei $x = 0$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi'(0) = ikA(\exp(ikr) - R \exp(-ikr)) \\ (2) \psi'(0) = iqAT \exp(iqr) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\rightarrow k(1 - R) = q(1 + R), \quad k - q = (k + q)R, \quad R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$



Interpretation: Wahrscheinlichkeit für Reflexion und Transmission

- Reflexionskoeffizient

$$r = |R|^2$$

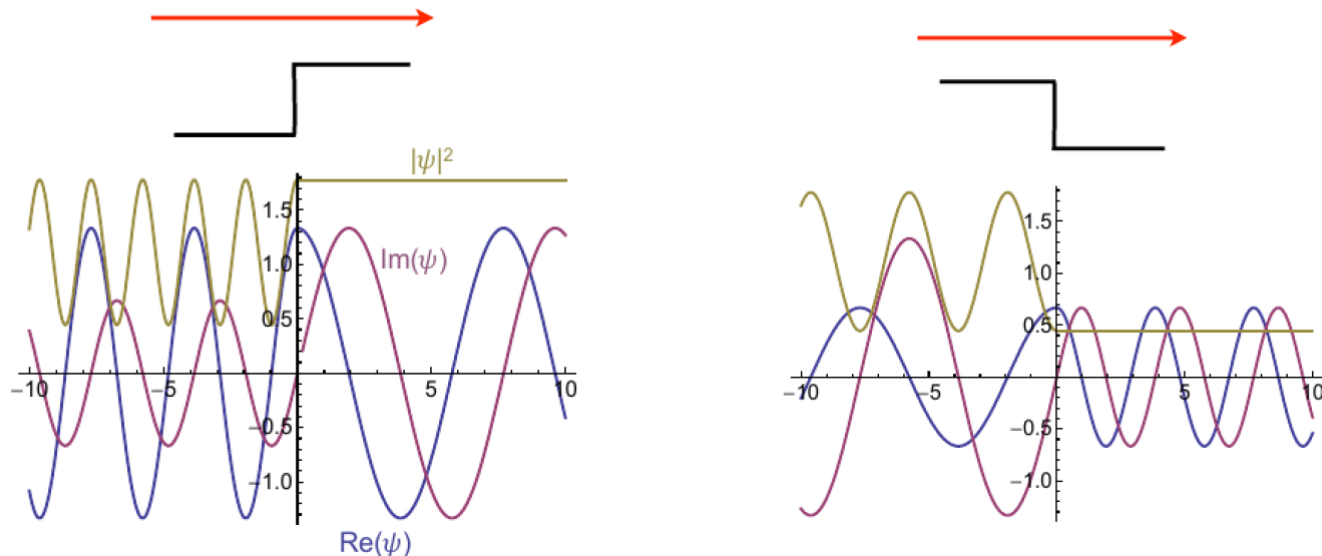
- Transmissionskoeffizient

$$t = 1 - r = \frac{q}{k} |T|^2$$

Betrachte Teilchenstrom
 $\rightarrow$ Geschwindigkeit in (1)
und (2) unterschiedlich!

Teilchenstrom an Potentialstufe

Grafische Darstellung der Lösung

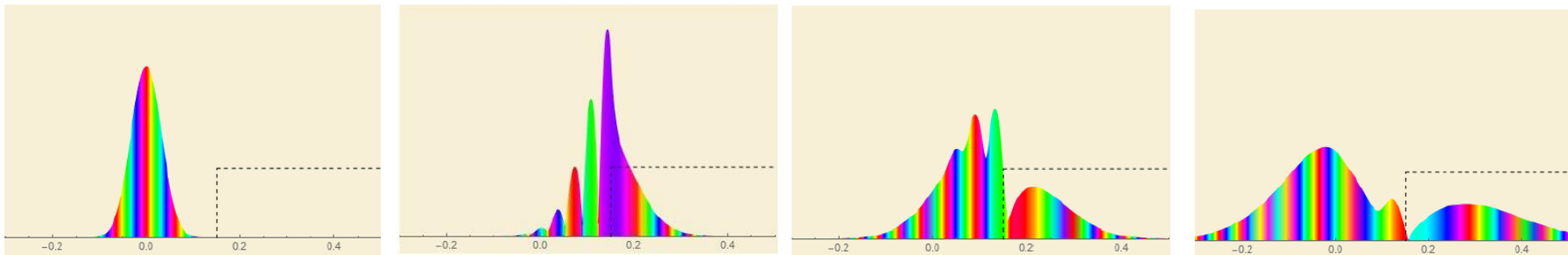


- $r \neq 0$ Reflexion analog zu Licht an Grenzfläche,
nicht erwartet für klassisches Teilchen
- Änderung der Wellenzahl
- $r \propto (k - q)^2$ unabhängig von Laufrichtung

Mathematica Simulation

Wellenpaket an Potentialstufe

- Dynamik Wellenpaket mit $E > V_0$ an der Potentialstufe
- Staatsexamensarbeit J. Rosenkranz (Siehe ILIAS)
- Lösung der zeitabhängigen SG. Mit Mathematica



Teilchenstrom an Potentialstufe

- Teilchenenergie < Potentialstufe, $E < V_0$

SG für Gebiet 1 (wie vorher)

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

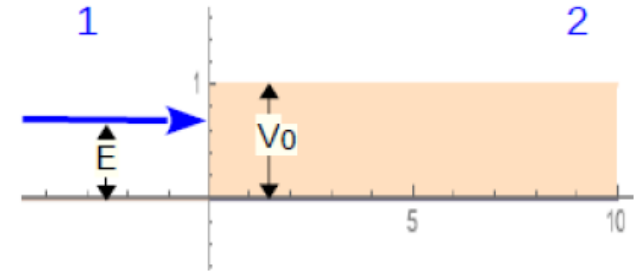
Ansatz

$$\psi_1 = A \exp(ikx) + R \exp(-ikx)$$

einfallend reflektiert

Lösungen der Stetigkeitsbedingungen

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \rightarrow r = |R|^2 = R^* R = 1$$



SG für Gebiet 2

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = (E - V) \psi(x)$$

$$\psi'' = -\frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi := \kappa^2 \psi$$

Ansatz

$$\psi_2 = AT \exp(-\kappa x),$$

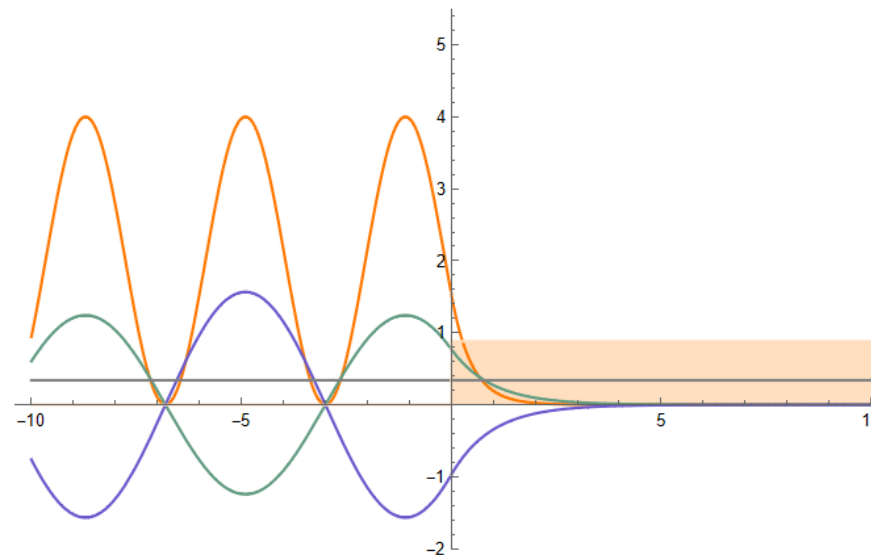
Dämpfung

→ Immer vollständige Reflexion!

Teilchenstrom an Potentialstufe

$$T = \frac{2k}{k+i\kappa} \rightarrow t = \frac{i\kappa}{k} |T|^2 = i \frac{4k\kappa}{k^2+\kappa^2} \neq 0 \text{ rein imaginär, kein Teilchenstrom}$$

- Wellenfunktion dringt um Länge $1/\kappa$ in klassisch verbotenen Bereich ein



Mathematica Simulation

Allgemein: stückweise konstante Potentiale

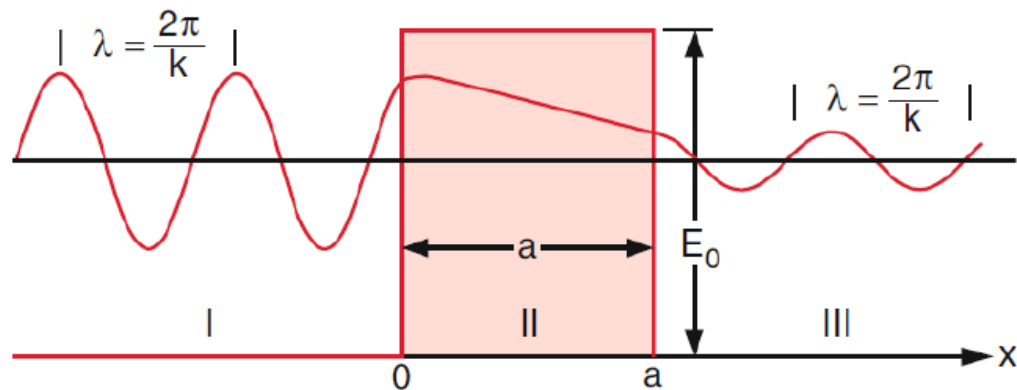
Allgemein:

- oszillierende Lösung wenn $E > V$ $A e^{ikx} + B e^{-ikx}$
- exponentiell abklingende Lösung wenn $E < V$ $A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$

Bsp. Potentialstufe

- Teilchen kann Barriere durchdringen trotz zu geringer Energie

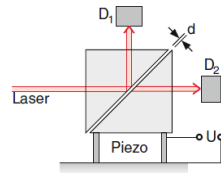
Tunneleffekt



Tunneleffekt

$$t = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E}(V_0 - E) \sinh(\kappa a)} \approx \frac{16E}{V_0^2} (V_0 - E) e^{-2\kappa a}$$

- Transmission > 0 auch für $E < E_0$
 - Transmission < 1 auch für $E > E_0$
- im Gegensatz zu klassischem Teilchen

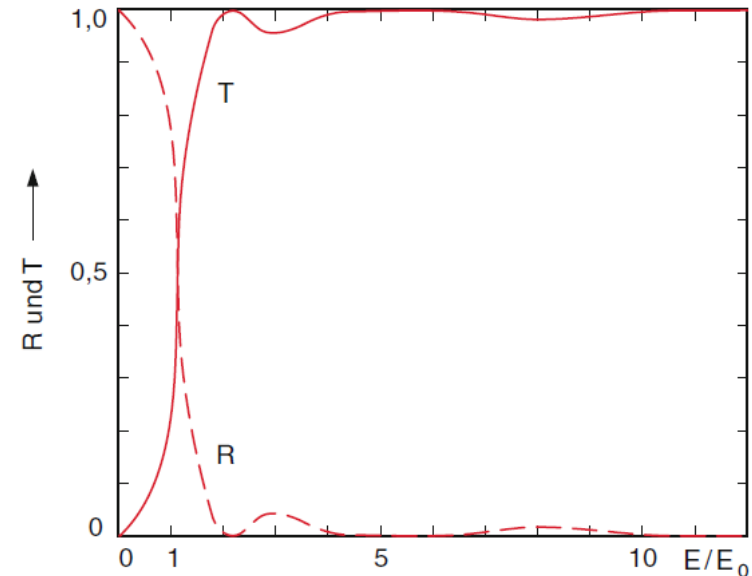
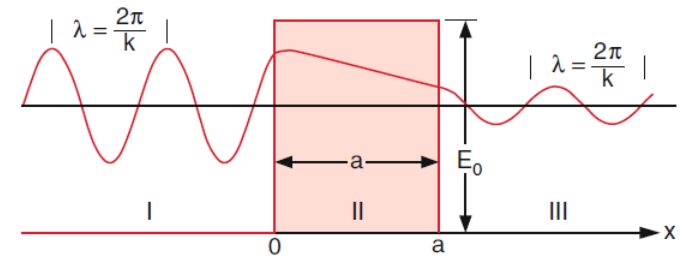


Analogie zur Optik

- Evaneszente Wellen
- Fabry-Perot Modulation bei Durchgang durch dünne Glasplatte

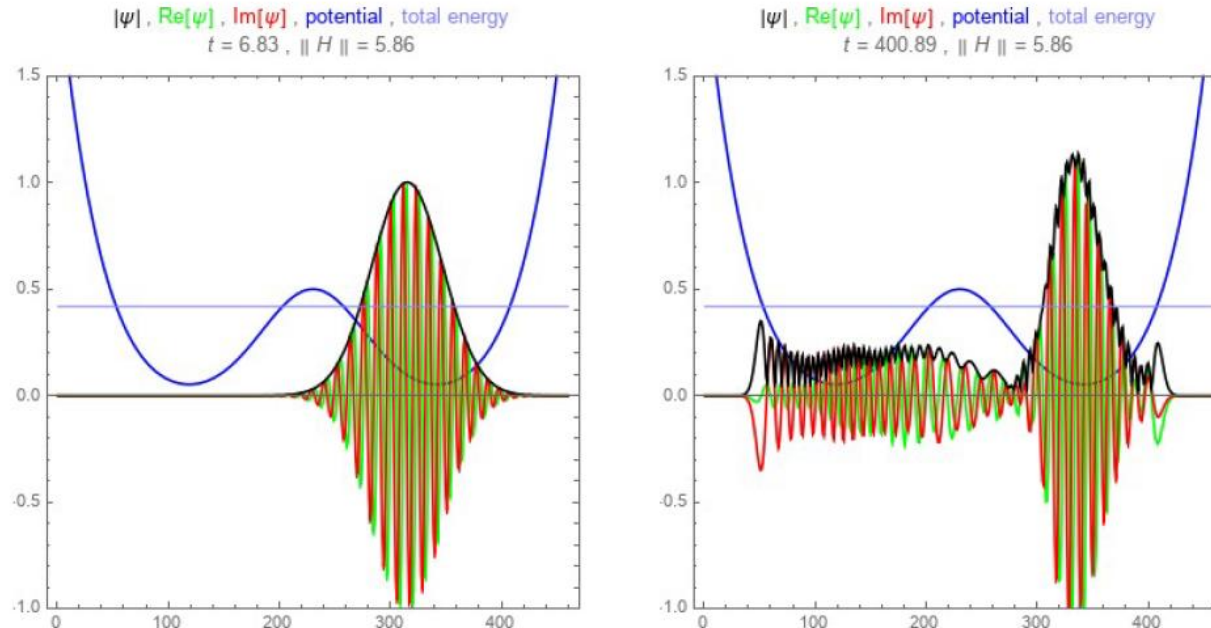
Wichtiger Effekt in der Physik

- Kernzerfälle, Kernfusion
- Chemische Reaktionen
- Molekulare Übergänge (z.B. NH3)
- Supraleitung
- Rastertunnelmikroskop



Tunneleffekt - Doppelmuldenpotential

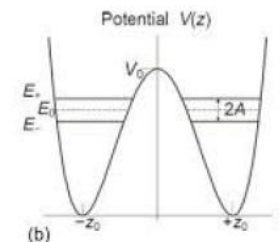
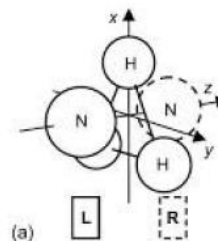
Simulation mit Mathematica



Wolfram / QuantumDynamics1D

Konkretes Beispiel **NH₃**:

Stickstoffatom tunnelt mit einer Frequenz von ~ 2 GHz zwischen der linken und rechten Position

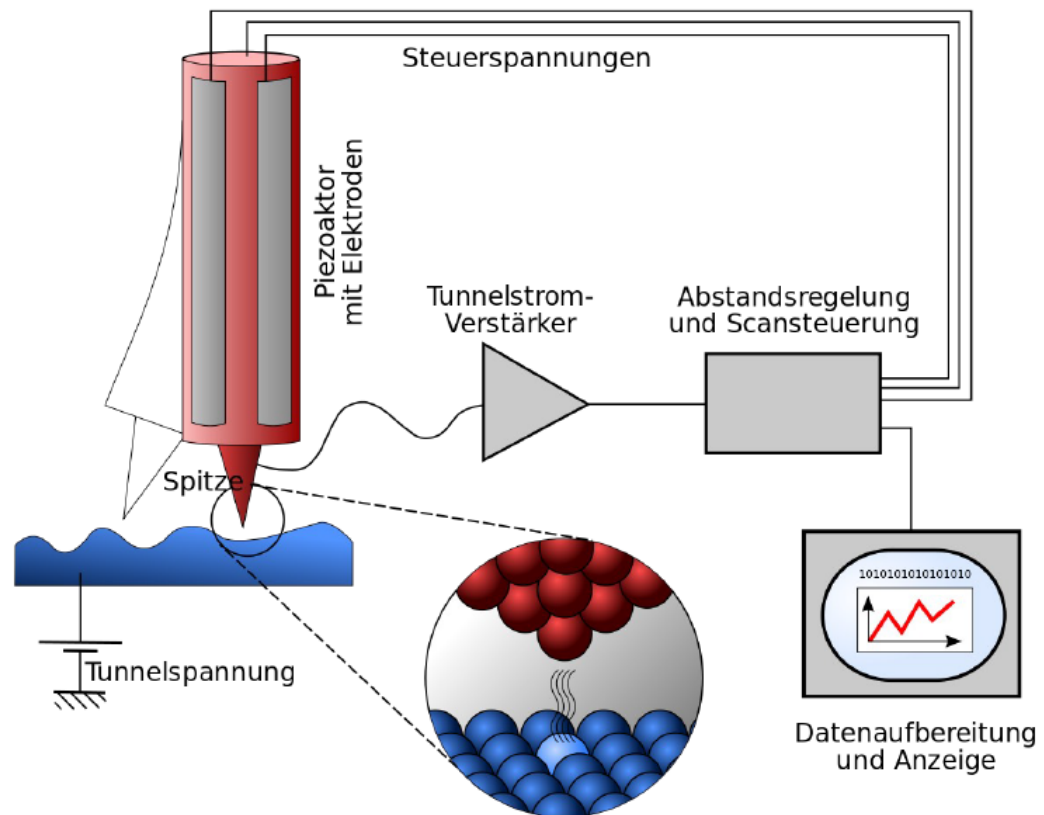


researchgate.net

Rastertunnelmikroskopie

Rastertunnelmikroskop: engl.: STM = scanning tunneling microscope
(G. Binnig, H. Rohrer, 1979)

- Abtasten von Probenoberflächen mit sehr feiner **Spitze** (1 Atom!)
- Elektronen **tunneln** von Spitze zu Oberfläche
- Konstanter **Abstand** zur Oberfläche → konstanter **Tunnelstrom** I_T (pA bis nA)



Wikipedia /Rastertunnelmikroskop