Übungszettel 4 - Tunneleffekt (Abgabetermin: 14.11.2017)

Aufgabe 1 - Näherung der zeitunabhängigen 1D Schrödingergleichung (26 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir ein Teilchen der Masse m in einer Dimension in einem Potential $V(x)$ mit Energie E wobei $E > \max_{x\in\mathbb{R}}[V(x)]$.

(a) Wir definieren $p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}$. Zeige, dass sich die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Wellenfunktion des Teilchens folgendermaßen schreiben lässt,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x) \ . \tag{1}$$

(b) Wir benutzen den allgemeinen Ansatz $\psi(x) = A(x)\,e^{i\varphi(x)}$. Zeige, dass sich dann Gleichung (1) zu folgendem Ausdruck umschreiben lässt,

$$A'' + 2iA'\varphi' + iA\varphi'' - A(\varphi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \ , \tag{2}$$

wobei wir der Kürze halber einfache Ableitungen durch $'$ und doppelte Ableitungen durch $''$ bezeichnen sowie die Argumente von p, A und φ weglassen.

(c) Zeige, dass die komplexe Differentialgleichung (2) sich auf folgende reelle Differentialgleichungen zurückführen lässt,

$$A'' = A\left[(\varphi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right] \ , \tag{3}$$

$$\left(A^2\varphi'\right)' = 0 \ . \tag{4}$$

Hinweis: A und φ sind reell. Man darf schon mal vorausgreifen, dass $\forall x:\ A(x) \neq 0$ (damit schließen wir nur die triviale Lösung aus, welche sowieso nicht normierbar wäre).

(d) Zeige, dass Gleichung (4) durch den Ansatz $A(x) = \frac{C}{\sqrt{|\varphi'(x)|}}$ gelöst wird, wobei $C \in \mathbb{R}$. Diskutiere auch kurz, was passiert, wenn $\varphi'(x) = 0$.

(e) Gleichung (3) ist nicht allgemein analytisch lösbar. Wenn wir aber annehmen, dass $A(x)$ sich nur sehr langsam verändert, dann ist $A'(x)$ klein und damit auch $A''(x)$. In nullter Ordnung nähern wir also $A''(x) = 0$. Zeige, dass dann Gleichung (3) durch den Ansatz $\varphi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int p(x)\ dx$ gelöst wird, wobei die (reelle!) Integrationskonstante des unbestimmten Integrals den freien Parameter der Lösung darstellt.
Bemerkung: Liebe mathematisch Interessierte. Das ist hier alles etwas unsauber, aber als Physiker kommen wir damit (meistens) durch. Es gibt Zusatzpunkte für das Hinschreiben einer $C^1(\mathbb{R})$ Funktion, deren Supremumsnorm beliebig klein ist, während die Supremumsnorm ihrer Ableitung beliebig groß ist. Und dann nennen wir solche Funktionen einfach pathologisch und unphysikalisch und ignorieren ihre Existenz. ☺

(f) Zeige, dass sich die allgemeine Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung in der Näherung langsamer räumlicher Variation der Wellenfunktion zu folgendem Ausdruck ergibt,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[C_1 e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^x p(x')\ dx'} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^x p(x')\ dx'}\right] \ . \tag{5}$$

Prüfe auch explizit ob die Zahl der freien Parameter der zu erwartenden Zahl entspricht. Begründe schließlich, warum die Näherung langsamer räumlicher Variation physikalisch sinnvoll ist, indem du den Ausdruck $|\psi(x)|^2$ betrachtest. Wann ist das Ergebnis aus Gleichung (5) exakt?
Hinweis: Zur Beantwortung der vorletzten Frage überlege, ob es wichtiger ist, die Wellenfunktion korrekt in den Bereichen darzustellen, in denen das Teilchen "langsam" ist oder in denen das Teilchen "schnell" ist.

Aufgabe 2 - Tunneln durch den Kasten (22 Punkte)

In Aufgabe 1 haben wir die genäherte Lösung der allgemeinen Schrödingergleichung in Bereichen mit $V(x) < E$ hergeleitet. Man kann quasi analog zeigen, dass in Bereichen $V(x) > E$ der folgende Ausdruck gilt

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C_1 e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\, dx'} + C_2 e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\, dx'} \right] . \tag{6}$$

(a) Skizziere das Potential $V(x) = V_0 \chi_{[0,a]}(x)$ für $V_0 > 0$. Notiere die formale Lösung der Schrödingergleichung in den Gebieten $]-\infty, 0]$, $[0, a]$ und $[a, \infty[$ (noch ohne Bestimmung der Koeffizienten!).
Hinweis: $\chi_{[0,a]}$ ist die charakteristische Funktion des Intervalls $[0, a]$. Sie ist gleich 1 innerhalb dieses Intervalls und sonst gleich 0. Da $V(x)$ stückweise konstant ist, stellen Gleichung (5) bzw. (6) tatsächlich die exakten Lösungen, ohne Näherung, dar.

(b) Wir betrachten von nun an eine von links einlaufende Welle, mit anderen Worten wir setzen den Koeffizienten vor e^{-ikx} in der Wellenfunktion im Bereich $[a, \infty[$ zu null. Stelle die Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktion und ihre Ableitung auf. Skizziere und interpretiere die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x)|^2$ für den "Tunnelfall" und das Passieren der Barriere. Welchen Energiebereichen entspricht dies jeweils?
Hinweis: Die Lösungen sind nicht normierbar. Wir setzen den Koeffizienten vor e^{ikx} im Bereich $]-\infty, 0]$ auf 1 um den überschüssigen freien Parameter fixieren. **Das Gleichungssystem muss nicht gelöst werden,** *die Skizze und Interpretation funktioniert auch ohne volle Lösung! Zwei der Koeffizienten sind durch folgende Ausdrücke gegeben (für passende Wahl von k_1 und k_2),*

$$C_2^{]-\infty,0]} = \frac{-i\left(k_1^2 - k_2^2\right)\sin(k_2 a)}{2k_1k_2\cos(k_2 a) - i\left(k_1^2 + k_2^2\right)\sin(k_2 a)}, \quad C_1^{[a,\infty[} = \frac{2k_1k_2 e^{-ik_1 a}}{2k_1k_2\cos(k_2 a) - i\left(k_1^2 + k_2^2\right)\sin(k_2 a)} \tag{7}$$

(c) Berechne die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\varphi^*(x)\frac{d}{dx}\varphi(x) - \varphi(x)\frac{d}{dx}\varphi^*(x)\right)$ der einfallenden ($\sim e^{ikx}$ für $x < 0$, wir nennen diese Stromdichte $j_0(x)$), reflektierten ($\sim e^{-ikx}$ für $x < 0$, wir nennen diese Stromdichte $j_r(x)$) und durchgelassenen ($\sim e^{ikx}$ für $x \geq a$, wir nennen diese Stromdichte $j_d(x)$) Teilwellen in den Lösungswellenfunktionen. Berechne den so genannten Transmissionskoeffizienten $T = \frac{|j_d|}{|j_0|}$ und den Reflexionskoeffizienten $R = \frac{|j_r|}{|j_0|}$. Skizziere den Transmissions- und Reflexionskoeffizienten in Abhängigkeit von a einmal für festes $(V_0 - E) > 0$ und einmal für festes $(E - V_0) > 0$. Interpretiere das Resultat physikalisch.
Hinweis: Benutze Gleichung (7). Zeige und benutze die Relationen $\cos(ix) = \cosh(x)$ sowie $\sin(ix) = i\sinh(x)$ für den Fall $(V_0 - E) > 0$.

Aufgabe 3 - Allgemeines Tunneln (12 Punkte)

Wir starten erneut von Gleichung (6). In dieser Aufgabe behandeln wir jedoch den Tunneleffekt für ein Potential beliebiger Form, also $V(x) = f(x)\chi_{[0,a]}(x)$, wobei $a > 0$ und $f \in C[0, a]$ (eine stetige Funktion auf dem Intervall $[0, a]$) mit Wertebereich $[f_{\min}, f_{\max}]$, wobei $f_{\max} > f_{\min} > 0$, sei.

(a) Für welche Energien E macht es Sinn, hier von einem reinen Tunnelproblem mit einem einzelnen Tunnel zu sprechen?

(b) Betrachte erneut eine von links einlaufende Welle der Energie E im Energiebereich nach Teilaufgabe (*a*). Zeige, dass in der Näherung nach Gleichung (6) der Transmissionskoeffizient für eine hohe und/oder breite Barriere durch den Ausdruck

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a |p(x')|\, dx'} \tag{8}$$

gegeben ist. $p(x)$ ist wie in Aufgabe (1*a*) definiert.
Anleitung: Motiviere zunächst warum $C_1 \simeq 0$ in Gleichung (6) gelten sollte. Überlege dir dazu, welcher Term in dieser Gleichung exponentiellem Abfall und welcher Term exponentiellem Ansteigen entspricht, und was physikalisch passieren sollte, wenn die Tunnelbarriere hoch / breit ist. Den Transmissionskoeffizienten hier über Ströme zu berechnen macht die Sache unnötig kompliziert, es ist viel leichter ihn über den Quotienten $\frac{|\psi(x=a)|^2}{|\psi(x=0)|^2}$ zu bestimmen (warum ist das sinnvoll?). Motiviere schließlich, warum $|p(0)| = |p(a)| = 0$ in physikalisch realistischen Situationen gelten sollte, wenn man abstrakter den Ort $x = 0$ als Tunneleingang und den Ort $x = a$ als Tunnelausgang interpretiert (stetige Potentiale). Wir teilen dann zwar null durch null bzw. unendlich durch unendlich, aber das ist in diesem Fall wirklich eins (man kann dies sauber zeigen, aber dazu braucht man Airy-Funktionen, und das wollte ich euch noch nicht antun).

(c) Bestimme mit Hilfe von Gleichung (8) den Transmissionskoeffizienten für $f(x) = \beta$ mit $\beta > 0$ für ein Teilchen der Energie $E < \beta$.