

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 7+
optionales Zusatzübungsblatt

1. Der Tunneleffekt

Betrachten Sie ein eindimensionales Teilchen der Masse m , das von links auf eine *endlich hohe* Potentialbarriere der Höhe V_0 und der Breite L zuläuft. Das Potential lautet dann wie folgt:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \text{ (Bereich I)} \\ V_0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \text{ (Bereich II)} \\ 0 & \text{für } x > L \text{ (Bereich III)} \end{cases}$$

In diesem Fall kann das Teilchen die Barriere überwinden, selbst wenn seine Energie E kleiner als die Barrierenhöhe V_0 ist (Tunneleffekt).

- a) Geben Sie die Schrödingergleichung für die drei oben definierten Bereiche an.
- b) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen

$$\Psi(x) = \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}}e^{ikx} + B_{\text{I}}e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ \psi_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}}e^{-\kappa x} + B_{\text{II}}e^{\kappa x} & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \psi_{\text{III}}(x) = A_{\text{III}}e^{ikx} + B_{\text{III}}e^{-ikx} & \text{für } x > L \end{cases}$$

mit $\{k, \kappa \in \mathbb{R} \mid k, \kappa > 0\}$ allgemeine Lösungen der Schrödingergleichung sind. Welche Beziehungen ergeben sich für k und κ ?

- c) In unserem Fall ist $B_{\text{III}} = 0$. Warum?
- d) Bestimmen Sie die Koeffizienten A_{II} und B_{II} in Abhängigkeit von $c := A_{\text{III}}e^{ikL}$.
Anleitung: Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ muss im Punkt $x = L$ stetig und stetig differenzierbar sein, d.h., es muss $\psi_{\text{II}}(L) = \psi_{\text{III}}(L)$ und $\frac{d}{dx}\psi_{\text{II}}(L) = \frac{d}{dx}\psi_{\text{III}}(L)$ gelten. Aus diesen Bedingungen erhalten Sie zwei Gleichungen für A_{II} , B_{II} und c , die Sie nach A_{II} bzw. B_{II} auflösen können.

Ergebnis:

$$A_{\text{II}} = \frac{c}{2} \left(1 - i \frac{k}{\kappa}\right) e^{\kappa L}$$

$$B_{\text{II}} = \frac{c}{2} \left(1 + i \frac{k}{\kappa}\right) e^{-\kappa L}$$

- e) Bestimmen Sie die Koeffizienten A_{I} und B_{I} in Abhängigkeit von A_{II} und B_{II} .
Anleitung: Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ muss im Punkt $x = 0$ stetig und stetig differenzierbar sein, d.h., es muss $\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0)$ und $\frac{d}{dx}\psi_{\text{I}}(0) = \frac{d}{dx}\psi_{\text{II}}(0)$ gelten. Aus diesen Bedingungen erhalten Sie zwei Gleichungen für A_{I} , B_{I} und A_{II} , B_{II} , die Sie nach A_{I} bzw. B_{I} auflösen können.

- f) Setzen Sie das Ergebnis aus Teilaufgabe d) in das aus Teilaufgabe e) ein, um die Koeffizienten A_I und B_I in Abhängigkeit von c zu erhalten. Benutzen Sie

$$\sinh(x) = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x})$$

$$\cosh(x) = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$$

um Ihr Ergebnis in die Form

$$A_I = \left(\cosh(\kappa L) + i \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \sinh(\kappa L) \right) c$$

$$B_I = -i \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \sinh(\kappa L) c$$

zu überführen.

- g) Der Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2}$$

gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass das Teilchen die Barriere überwindet. Bestimmen Sie T .

Anleitung: Benutzen Sie $\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$, um

$$T = \left(1 + \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} \sinh^2(\kappa L) \right)^{-1}$$

zu erhalten. Einsetzen von κ und k liefert dann das Endergebnis

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} L \right) \right)^{-1}$$