Musterlösung der Übung 7+ zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19

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.

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \text{ , wobei } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{1}$$

Dann ist:

$$\begin{aligned} &\text{Bereich I:} & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) &= E\Psi(x) \\ &\text{Bereich II:} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\Psi(x) &= E\Psi(x) \\ &\text{Bereich III:} & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) &= E\Psi(x) \end{aligned} \tag{2}$$

b) Zeigen Sie, dass die folgenden Wellenfunktionen allgemeine Lösungen der Schrödingergleichung sind. Welche Beziehungen ergeben sich für k und κ

$$\Psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} & \text{für } x < 0, \\ \psi_{II}(x) = A_{II} e^{-\kappa x} + B_{II} e^{\kappa x} & \text{für } 0 \leq x \leq, \\ \psi_{III}(x) = A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx} & \text{für } x > L \end{cases} \tag{3}$$

$$\{k, \kappa \in \mathbb{R} | k, \kappa > 0\} \tag{4}$$

Bereich I $(\mathbf{x < 0})$, $\mathbf{\Psi(x) = \psi_I(x)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}\right) \tag{5}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[(ik)^2 A_I e^{ikx} + (-ik)^2 B_I e^{-ikx}\right] \tag{6}$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}\right) = E\Psi(x) \tag{7}$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \;\Rightarrow\; k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \;\Rightarrow\; k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{8}$$

Bereich II $(\mathbf{0 \leq x \leq L})$, $\mathbf{\Psi(x) = \psi_{II}(x)}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\psi_{II}(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\left(B_{II} e^{\kappa x} + A_{II} e^{-\kappa x}\right) \tag{9}$$

$$= \left(\frac{-\hbar^2 \kappa^2}{2m} + V_0\right)\psi_{II}(x) = E\Psi(x) \tag{10}$$

$$\Rightarrow E = \left(\frac{-\hbar^2 \kappa^2}{2m} + V_0\right) \;\Rightarrow\; \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \tag{11}$$

Bereich III $(\mathbf{x > L})$, $\mathbf{\Psi(x) = \psi_{III}(x)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}\right) \tag{12}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[(ik)^2 A_{III} e^{ikx} + (-ik)^2 B_{III} e^{-ikx}\right] \tag{13}$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}\right) = E\Psi(x) \tag{14}$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \;\Rightarrow\; k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \;\Rightarrow\; k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{15}$$

c) In unserem Fall ist $\mathbf{B_{III} = 0}$. Warum?

Im *Bereich I* beschreibt $\psi_I(x)$ die Bewegung der Wellenfunktion von links nach rechts $\left(A_I e^{ikx}\right)$, sowie die entgegengesetzte Bewegung des reflektierten Teils der Wellenfunktion nach dem Auftreffen auf die Barriere $\left(B_I e^{-ikx}\right)$. Im Bereich der Barriere (Bereich II) läuft der in die Barriere eingedrungene Teil der Wellenfunktion aus *Bereich I* weiter von links nach rechts $(B_{II} e^{\kappa x})$ bis dieser auf den Rand der Barriere trifft $(x = L)$. Hier wird wieder ein Teil der Wellenfunktion reflektiert $(A_{II} e^{-\kappa x})$. Der transmittierte Anteil der Wellenfunktion (*Bereich III*) letzendlich bewegt sich weiter nach rechts $\left(A_{III} e^{ikx}\right)$. Da sich ab $x > L$ keine weitere Barriere befindet, gibt es jedoch keinen reflektierten Anteil $\left(B_{III} e^{-ikx}\right)$, was bedeutet, dass $B_{III} = 0$ sein muss.

d) Bestimmen Sie die Koeffizienten A_{II} und B_{II} in Abhängigkeit von $c := A_{III}e^{ikL}$

Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ muss im Punkt $x = L$ stetig und stetig differenzierbar sein, d.h. es muss $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$ und $d_x\psi_{II}(L) = d_x\psi_{III}(L)$ gelten. Aus diesen Bedingungen erhalten Sie zwei Gleichungen für A_{II}, A_{II} und c, die Sie nach A_{II} bzw. B_{II} auflösen können:

$$\psi_{II}(L) \stackrel{!}{=} \psi_{III}(L) \Rightarrow B_{II}e^{\kappa L} + A_{II}e^{-\kappa L} = \underbrace{A_{III}e^{ikL}}_{:=c} \tag{16}$$

$$d_x\psi_{II}(L) \stackrel{!}{=} d_x\psi_{III}(L) \Rightarrow \kappa B_{II}e^{\kappa L} - \kappa A_{II}^{-\kappa L} = \underbrace{ikA_{III}e^{ikL}}_{:=ikc} \tag{17}$$

Es ergeben sich also die Gleichungen:

$$\begin{aligned} &1 \quad B_{II}e^{\kappa L} + A_{II}e^{-\kappa L} = c \\ &2 \quad B_{II}e^{\kappa L} - A_{II}e^{-\kappa L} = i\frac{k}{\kappa}c \end{aligned} \tag{18}$$

Addition bzw. Subtraktion liefert die Ausdrücke für die beiden Koeffizienten:

$$1 + 2 \Rightarrow 2B_{II}e^{\kappa L} = \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)c \Rightarrow B_{II} = \underline{\underline{\frac{c}{2}\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-\kappa L}}} \tag{19}$$

$$1 - 2 \Rightarrow 2A_{II}e^{-\kappa L} = \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)c \Rightarrow A_{II} = \underline{\underline{\frac{c}{2}\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)e^{\kappa L}}} \tag{20}$$

e) Bestimmen Sie die Koeffizienten A_I und B_I in Abhängigkeit von A_{II} und B_{II}.

Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ muss im Punkt $x = 0$ stetig und stetig differenzierbar sein, d.h. es muss $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ und $d_x\psi_I(0) = d_x\psi_{II}(0)$ 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:

$$\psi_I(0) \stackrel{!}{=} \psi_{II}(0) \Rightarrow A_I e^{ik0} + B_I e^{-ik0} = A_{II}e^{-\kappa 0} + B_{II}e^{\kappa 0} \tag{21}$$

$$\Rightarrow A_I + B_I = A_{II} + B_{II} \tag{22}$$

$$d_x\psi_I(0) \stackrel{!}{=} d_x\psi_{II}(0) \Rightarrow ikA_I - ikB_I = \kappa B_{II} - \kappa A_{II} \tag{23}$$

$$\Rightarrow A_I - B_I = -i\frac{\kappa}{k}\left(B_{II} - A_{II}\right) \tag{24}$$

Das Gleichungssystem lautet also:

$$\begin{aligned} &1 \quad A_I + B_I = A_{II} + B_{II} \\ &2 \quad A_I - B_I = -i\frac{\kappa}{k}\left(B_{II} - A_{II}\right) \end{aligned} \tag{25}$$

Wiederum ergeben Addition bzw. Subtraktion die Ausdrücke für A_I bzw. B_I:

$$1+2 \Rightarrow 2A_I = A_{II}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right) + B_{II}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right) \Rightarrow A_I = \underline{\underline{\frac{1}{2}\left[A_{II}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right) + B_{II}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)\right]}} \tag{26}$$

$$1-2 \Rightarrow 2B_I = A_{II}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right) + B_{II}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right) \Rightarrow B_I = \underline{\underline{\frac{1}{2}\left[A_{II}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right) + B_{II}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right)\right]}} \tag{27}$$

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 $sinh(x) = \frac{1}{2}\left(e^x - e^{-x}\right)$ und $cosh(x) = \frac{1}{2}\left(e^x + e^{-x}\right)$, um Ihr Ergebnis in die Form

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

umzuschreiben.

A_I:

$$\begin{aligned}
A_I &= \frac{1}{2}\left[A_{II}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right) + B_{II}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)\right] && (28)\\
&= \frac{1}{2}\left[\frac{c}{2}\left(1-i\frac{k}{\kappa}\right)e^{\kappa L}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right) + \frac{c}{2}\left(1+i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-\kappa L}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)\right] && (29)\\
&= \frac{1}{4}c\left[\left(1-i\frac{k}{\kappa}+i\frac{\kappa}{k}+1\right)e^{\kappa L} + \left(1-i\frac{\kappa}{k}+i\frac{k}{\kappa}+1\right)e^{-\kappa L}\right] && (30)\\
&= \frac{1}{4}c\left[\left(2+i\frac{\kappa^2-k^2}{\kappa k}\right)e^{\kappa L} + \left(2+i\frac{k^2-\kappa^2}{\kappa k}\right)e^{-\kappa L}\right] && (31)\\
&= \frac{1}{4}c\left[2\underbrace{\left(e^{\kappa L}+e^{-\kappa L}\right)}_{=\,2\cdot cosh(\kappa L)} + i\frac{\kappa^2-k^2}{\kappa k}\underbrace{\left(e^{\kappa L}-e^{-\kappa l}\right)}_{=\,2\cdot sinh(\kappa L)}\right] && (32)\\
&= \underline{\underline{c\left(cosh(\kappa L) + \frac{1}{2}i\frac{\kappa^2-k^2}{\kappa k}sinh(\kappa L)\right)}} && (33)
\end{aligned}$$

B_I:

$$B_I = \frac{1}{2}\left[\frac{c}{2}\left(1-i\frac{k}{\kappa}\right)e^{\kappa L}\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)+\frac{c}{2}\left(1+i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-\kappa L}\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right)\right] \tag{34}$$

$$= \frac{1}{4}c\left[\left(1-i\frac{\kappa}{k}-i\frac{k}{\kappa}-1\right)e^{\kappa L}+\left(1+i\frac{k}{\kappa}+i\frac{\kappa}{k}-1\right)e^{-\kappa L}\right] \tag{35}$$

$$= \frac{1}{4}c\left[(-i)\frac{\kappa^2+k^2}{k\kappa}e^{\kappa L}+i\frac{k^2+\kappa^2}{k\kappa}e^{-\kappa L}\right] \tag{36}$$

$$= \frac{1}{4}c\left[-i\frac{\kappa^2+k^2}{k\kappa}\underbrace{\left(e^{\kappa L}-e^{-\kappa L}\right)}_{=\ 2\cdot sinh(\kappa L)}\right] \tag{37}$$

$$= \underline{\underline{-\frac{1}{2}ic\frac{\kappa^2+k^2}{k\kappa}sinh(\kappa L)}} \tag{38}$$

g) Der Transmissionskoeffizient $T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2}$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass das Teilchen die Barriere überwindet. Bestimmen Sie T.

Benutzen Sie $cosh^2(x) = 1 + sinh^2(x)$, um $T = \left(1+\frac{(\kappa^2+k^2)^2}{4\kappa^2k^2}sinh^2(\kappa L)\right)^{-1}$ zu erhalten. Einsetzen von κ und k liefert dann das Endergebnis:

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

$$c = A_{III} e^{ikL} \tag{39}$$

$$|c|^2 = |A_{III}|^2 e^{ikL} e^{-ikL} = |A_{III}|^2 \tag{40}$$

$$\Rightarrow T = \frac{|A_{III}|^2}{A_I^* A_I} = \frac{|c|^2}{|c|^2 \cdot \left| \left[cosh(\kappa L) + i \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} sinh(\kappa L) \right] \right|^2} \tag{41}$$

$$= \frac{1}{cosh^2(\kappa L) + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} sinh^2(\kappa L)} \tag{42}$$

$$= \frac{1}{1 + sinh^2(\kappa L) + \frac{\kappa^4 - 2\kappa^2 k^2 + k^4}{4\kappa^2 k^2} sinh^2(\kappa L)} \tag{43}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{4\kappa^2 k^2 + \kappa^4 - 2\kappa^2 k^2 + k^4}{4\kappa^2 k^2} sinh^2(\kappa L)} \tag{44}$$

$$= \underline{\underline{\frac{1}{1 + \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} sinh^2(\kappa L)}}} \tag{45}$$

Einsetzen von κ und k aus Aufgabe **1b)**:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{\left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2}{4 \frac{4m^2 E(V_0 - E)}{\hbar^4}} sinh^2\left(L \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)} \tag{46}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{\left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^2}{4 \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} sinh^2\left(L \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)} \tag{47}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2}{4 \frac{4m^2 E(V_0 - E)}{\hbar^4}}} \tag{48}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{4m^2 V_0^2}{4 \cdot 4m^2 E(V_0 - E)} sinh^2\left(L \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)} \tag{49}$$

$$= \underline{\underline{\frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sinh^2\left(L \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)}}} \tag{50}$$