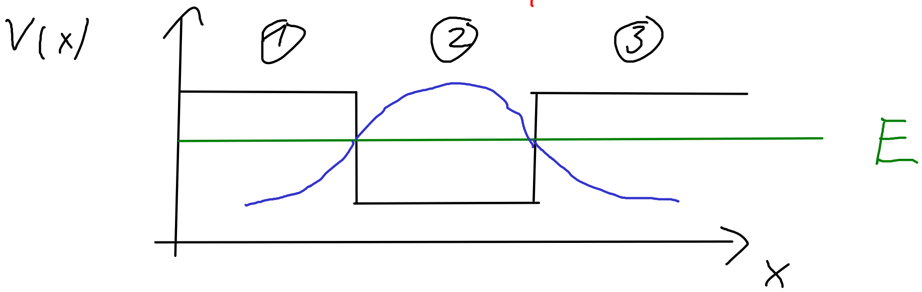
13.5.08

Bloch-Gleichungen kein Drehmatrix

2.2.7 1D endlich tiefe Potentialtopf



$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_n\right)\psi_n = E\psi_n$$

n: Bereich 1, 2, 3

Ansatz:

$$\psi_n(x) = e^{\alpha x} \quad \Rightarrow \quad \alpha_n = \pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_n - E)}$$

1) $E \geq V_n \quad \Rightarrow \quad \alpha_n = \pm i k_n \quad ; \; k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)}$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = A_+ e^{i k_n x} + A_- e^{-i k_n x}$$

2) $E \leq V_n \quad \Rightarrow \quad \alpha_n = \pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_n - E)}$

$$\psi_n(x) = A_+ e^{\alpha_n x} + A_- e^{-\alpha_n x}$$

- Stetigkeit an den Grenzflächen von $\psi_n(x)$ sowie $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$
- $\psi(x \to \pm\infty) = 0$ sonst Zustand nicht normierbar

Im Bild: links ist $A_- = 0$, rechts ist $A_+ = 0$

$\Rightarrow$ 4 Unbekannte und 4 Grenzflächenbedingungen

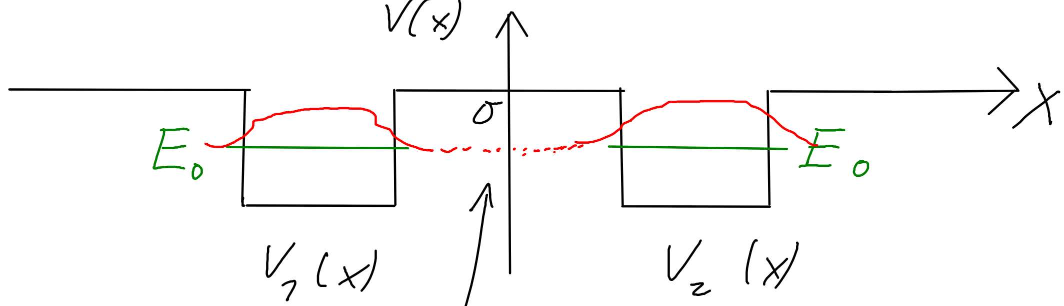
Analog planarer Schichtwellenleiter (Ex III, Kap 3.2.5)

$\Rightarrow$ • $\exists$ mind. einen gebundenen Zustand

- Je tiefer der Topf, um so mehr gebundene Zustände

2.2.8 Gekoppelte Potentialtöpfe

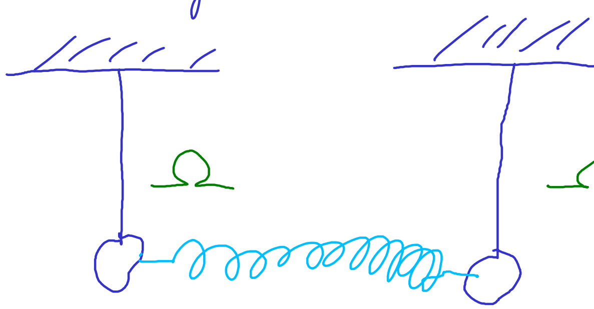
(ein einfaches Modell für Moleküle)



was passiert, wenn man die Töpfe einander nähert?

Was passiert mit dem entarteten Grundzustand der Energie E_0, wenn die Töpfe näher aneinander gebracht werden?

klassisches Analogon:



$\Rightarrow$ Aufspaltung in niederfrequente, symmetrische Schwingung und eine hochfrequente, antisymmetrische Mode.

QM

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x) + V_2(x)$$

Ansatz: (Näherung)

$$\Psi(x) = a_1\,\psi_1(x) + a_2\,\psi_2(x)$$

Eigenfunktion zum Eigenwert E_0 wenn nur ein Potentialtopf vorhanden ist

Einsetzen

$\hat{H}\psi = E\psi$

$$= a_1 E_0 \psi_1(x) + a_1 V_2(x)\psi_1(x)$$
$$+ a_2 E_0 \psi_2(x) + a_2 V_1(x)\psi_2(x)$$
$$= a_1 E \psi_1(x) + a E \psi_2(x)$$

$(E \neq E_0)$

wie 2 niveau - System: $\left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot \; dx \right.$

$$\Rightarrow a_1 E_0 + a_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) V_2(x) \psi_1(x)\, dx$$

$$+ a_2 E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)\, dx + a_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) V_1(x) \psi_2(x)\, dx$$

$$= a_1 E + a_2 E \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)\, dx$$

analog $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \cdot \; dx$

$$\Rightarrow a_1 E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\psi_2^*(x)\, dx + a_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x) V_2(x) \psi_2^*(x)\, dx$$

$$+ a_2 E_0 + a_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x) V_1(x)\psi_2(x)\, dx$$

$$= a_1 E \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\psi_2^*(x)\, dx + a_2 E$$

Man möchte (Form entsprechend obigen Integral)

$$\begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ B_2 & A_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & b_1 \\ b_2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

Invertieren $\frac{1}{1-b^2}\begin{pmatrix} 1 & -b \\ -b & 1 \end{pmatrix}$

$A_1 = E_0 + \int \psi_1^* V_2 \psi_1$

$A_2 = E_0 + \int \psi_2^* V_1 \psi_2$

$B_1 = E_0 \int \psi_1^* \psi_2 + \int \psi_1^* V_1 \psi_2$

$B_2 = E_0 \int \psi_2^* \psi_1 + \int \psi_2^* V_2 \psi_1$

$b_1 = \int \psi_1^* \psi_2$

$b_2 = \int \psi_2^* \psi_1$

$B_1 = B_2$ da $\psi_1^x = \psi_1$
analog A, b

$\Rightarrow$ Eigenwertgleichung

$$\boxed{\begin{pmatrix} \tilde{E}_0 & K \\ K & \tilde{E}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}}$$

Für Überlappintegrale $= 0$ $\Rightarrow$ $\tilde{E}_0 = E_0$ und $K = 0$

$\Rightarrow$ Eigenwerte

$$\boxed{E = \tilde{E}_0 \pm |K|}$$

$\hat{=}$ Aufhebung der Entartung

Eigenzustände (Eigenfunktionen)

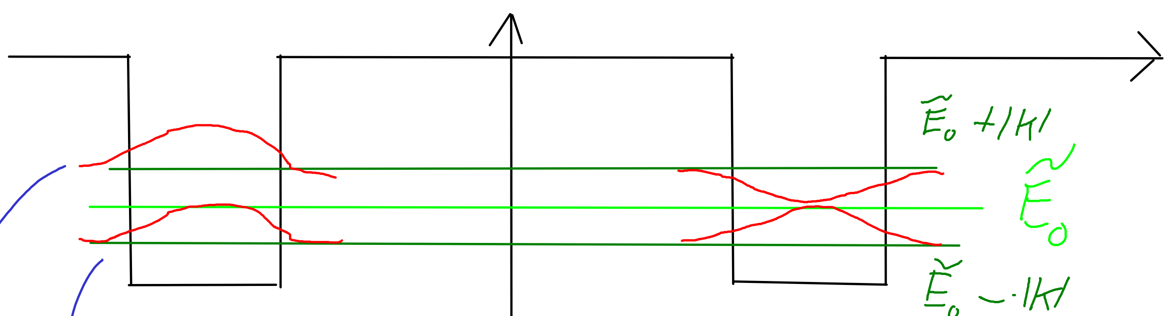
Beachte $K < 0$

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_0 & K \\ K & \tilde{E}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = (\tilde{E}_0 \pm |K|) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \cancel{\tilde{E}_0} a_1 + K a_2 = \cancel{\tilde{E}_0} a_1 \pm |K| a_1$$

$$\Longrightarrow a_1 = \mp a_2 \qquad (\text{wegen } K < 0)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x) \mp \psi_2(x) \right)$$

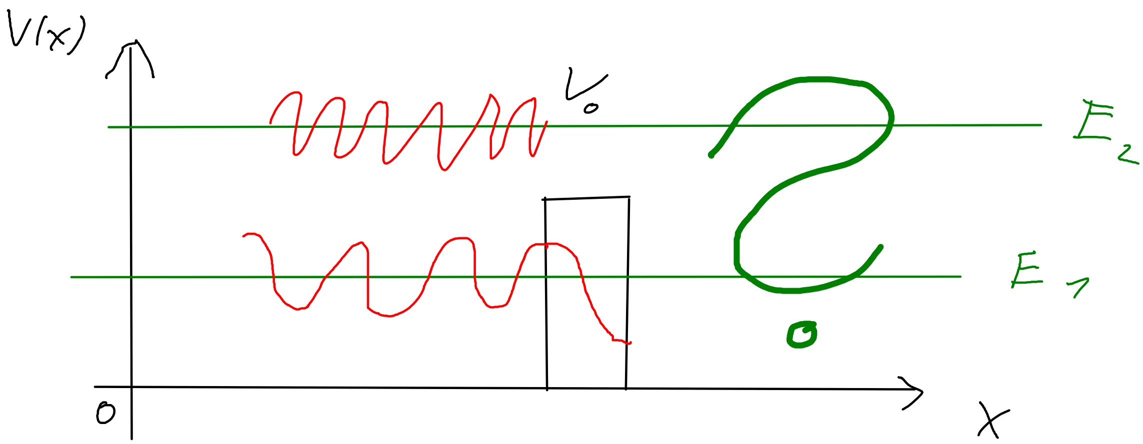


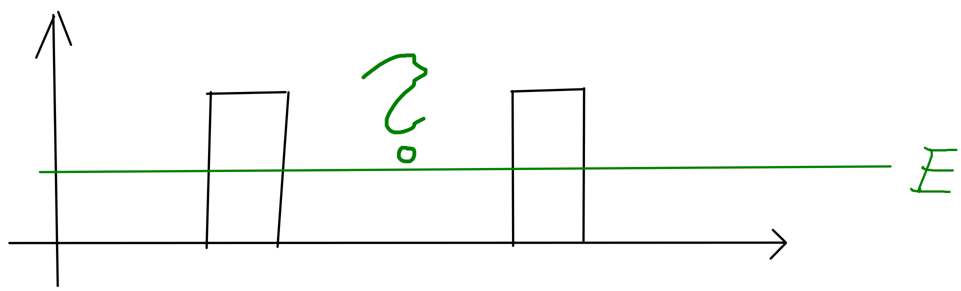
Symmetrischer, chem. Bindender Zustand

antisymmetrischer Zustand (antibindender Zustand)

2.2.9 Potentialbarrieren

Teilchenstrom, Transmissionskoeff.





Diskrete Energieeigenwerte

bzw. Wellenfkt. nicht normierbar

Idee: Lasse ebene Welle von links einfallen und frage nach Transmissions-wahrscheinlichkeit T

hierzu benötigen wir die Teilchenstromdichte $\vec{j}$, $[j] = m^{-2}s^{-1}$

Wir erwarten:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(x)|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j = 0$$