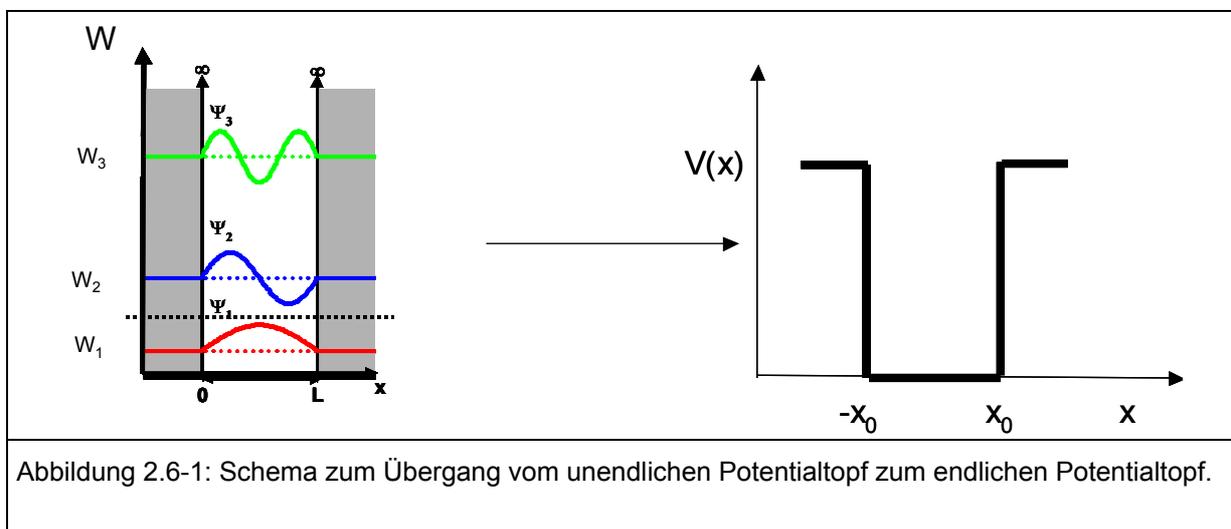


2.6. Der endliche Potentialtopf

Anhand des *unendlichen* Potentialtopfes können nahezu alle grundsätzlichen Eigenschaften von elektronischen Eigenzuständen diskutiert werden. Aufgrund der Einfachheit der Lösungen können an ihm die Merkwürdigkeiten der Quantenmechanik ohne allzu viel mathematischen Ballast erläutert und auch viele Eigenschaften von modernen elektronischen Bauelementen qualitativ verstanden werden. Realistische Rechnungen müssen allerdings über die Näherung eines unendlichen Potentials hinausgehen. Noch wichtiger ist aber, dass bei der Näherung ein auch technisch wichtiger Effekt der Quantenmechanik, nämlich der *Tunneleffekt*, vollständig verloren geht. Die folgenden Betrachtungen widmen sich daher einem Potentialtopf mit *endlich* hohen Wänden.



2.6.1. Stetigkeitsbedingungen

Für ein Verständnis der Struktur der Lösungen des endlichen Potentialtopfes ist noch eine etwas genauere Betrachtung der Randbedingungen erforderlich als beim unendlichen Potentialtopf.

Die Wellenfunktionen im auf der linken Seite in Abbildung 2.6-1 gezeigten unendlichen Potentialtopf haben jeweils am Rand des Potentialtopfes eine Nullstelle. Aus der Forderung nach dem Verschwinden der Wellenfunktion im unendlichen Potentialgebiet und der Forderung nach Stetigkeit der Wellenfunktion ergab sich die Forderung nach einer Nullstelle am Rand. Dies wiederum führte dann zu einer diskreten Struktur der Lösungen. Nicht alle Wellenfunktionen, die die Schrödingergleichung im Innern des Potentialtopfes lösen sind auch Lösungen des Gesamtproblems.

Schauen wir uns die Forderungen nachträglich noch einmal etwas genauer an und versuchen wir dann, das Ganze auf den in der Abbildung 2.6-1 auf der rechten Seite gezeigten Fall den endlichen Potentialtopfes zu verallgemeinern:

Das Verschwinden der Wellenfunktion für ein unendliches Potential ergibt sich daher, dass

$$W(x) = \psi^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x) \quad 2.6-1$$

sowas wie die Energiedichte darstellt. Bei einem divergierenden $V(x)$ muss daher die Wellenfunktion $\psi(x)$ gleich Null sein, da es sonst zu einer unphysikalischen divergierenden Energiedichte käme.

Die Forderung nach der Stetigkeit der Wellenfunktion kann mit einem ähnlichen Argument plausibel gemacht werden:

$$p(x) = \psi^*(x) \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) \quad 2.6-2$$

ist sowas wie eine Impulsdichte. Wäre $\psi(x)$ unstetig, so divergierte aufgrund der Ableitung nach dem Ort diese Dichte. Dies ist ebenso unphysikalisch.

Diese beide Bedingungen haben wir schon beim unendlichen Potentialtopf ausgenutzt. Für einen endlichen Potentialtopf müssen wir uns mit den Eigenschaften einer Wellenfunktion an einer Sprungstelle eines Potential $V(x)$ beschäftigen².

Gehen wir hierzu von der Schrödinger-Gleichung aus, und integrieren diese in einem kleinen Intervall rund um die Sprungstelle x_0 :

Aus

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x) = W\psi(x) \quad 2.6-3$$

²Man mag sich an dieser Stelle fragen, ob ein unstetiges Potential nicht genauso unphysikalisch ist. Beim genauen Hinschauen auf einer Längenskala von Atomen wird sich nämlich jegliches Potential als stetig entpuppen. So genau schaut man aber bei der Diskussion von Bauelementen (fast) nie hin und die Näherung eines Potentialsprungs macht die Betrachtungen mathematisch viel einfacher.

wird dann bei Integration der S-Glg. von $x_0 - \delta$ bis $x_0 + \delta$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(x_0 + \delta) - \psi'(x_0 - \delta)) + \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} V(x)\psi(x)dx = \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} W\psi(x)dx, \quad 2.6-4$$

wobei $\psi'(x)$ die erste räumliche Ableitung der Wellenfunktion ist. Macht man nun das Integrationsintervall um x_0 immer kleiner, führt also den Grenzübergang $\delta \rightarrow 0$ durch, so verschwindet der Term auf der rechten Seite der Gleichung bei endlichem Energieeigenwert und endlicher Wellenfunktion (und alles andere wäre unphysikalisch). Genauso geht bei einem endlichen Potential auch das Integral auf der linken Seite der Gleichung gegen Null. Es gilt also:

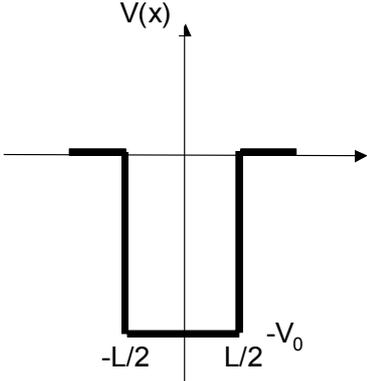
$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(x_0 + \delta) - \psi'(x_0 - \delta)) + \underbrace{\int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} V(x)\psi(x)dx}_{\rightarrow 0 \text{ für } \delta \rightarrow 0 (\text{falls } V \text{ endlich})} = \underbrace{\int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} W\psi(x)dx}_{\rightarrow 0 \text{ für } \delta \rightarrow 0}, \quad 2.6-5$$

und damit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(x_0 + \delta) - \psi'(x_0 - \delta)) \rightarrow 0 \text{ für } \delta \rightarrow 0 \quad 2.6-6$$

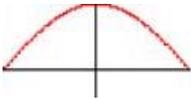
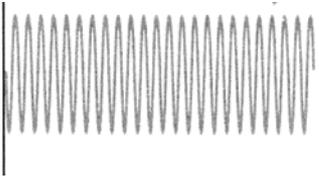
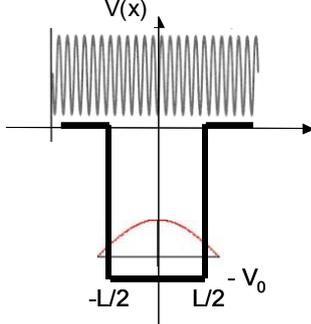
Dies bedeutet, dass $\psi(x)$ bei einem endlichen Potentialsprung ΔV stetig differenzierbar sein muss.

2.6.2. Struktur der Lösungen

	$V(x) = \begin{cases} 0 & : x > \frac{L}{2} \\ -V_0 & : x \leq \frac{L}{2} \end{cases}$
<p>Abbildung 2.6-2: Schema eines endlichen Potentialtopfes in der in den meisten Lehrbüchern üblichen Darstellung, in der der Potentialtopf symmetrisch rund um den Nullpunkt liegt.</p>	<p style="text-align: right;">Glg. 2.6-7</p>

Mit dem bisherigen Wissen über quantenmechanische Zustände werden wir schon intuitiv ziemlich viel über die Natur der Lösungen aussagen können: Hat das Elektron nicht genügend Energie, um dem Potentialtopf zu entkommen, so vermuten wir ähnliche Lösungen wie beim unendlichen Potentialtopf. Hierbei ist das Elektron „gebunden“, also lokalisiert und die Wellenfunktion verschwindet im Unendlichen.

Befindet sich das Elektron hingegen nicht im Potentialtopf, so vermuten wir ähnliche Lösungen wie beim freien quantenmechanischen Elektron, also komplett delokalisierte Elektronen, mathematisch dargestellt durch ebene Wellen. Diese werden als Kontinuumslösungen bezeichnet.

		
<p>Abbildung 2.6-3: Visualisierung eines lokalisierten Zustandes.</p>	<p>Abbildung 2.6-4: Visualisierung eines komplett delokalisierten Zustandes, einer ebenen Welle.</p>	<p>Abbildung 2.6-5: Visualisierung der verschiedenen Lösungen des endlichen Potentialtopfes. Die Art Wellenfunktion wird durch die Energie des Elektrons bestimmt.</p>

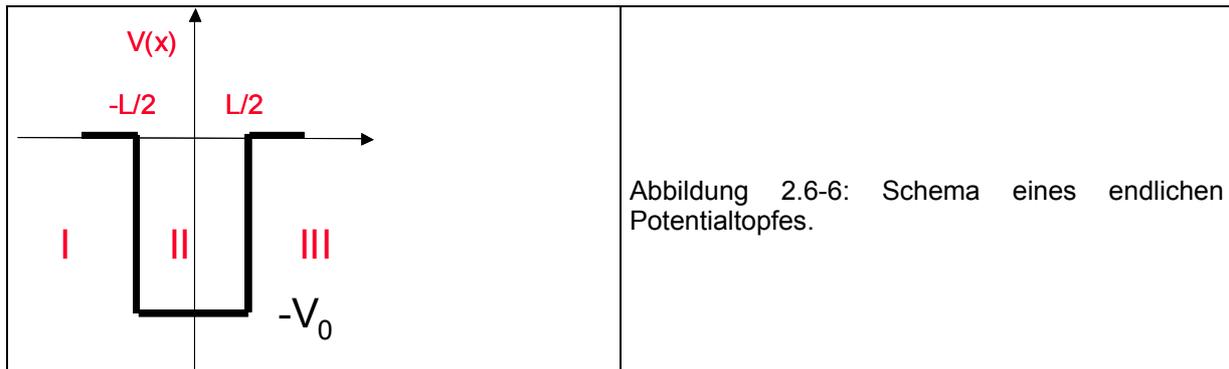
2.6.3. Gebundene Lösungen

Auch klassisch gibt es gebundene Lösungen, sofern die Energie W des Elektrons < 0 ist. Klassisch verharrt ein Teilchen bei $W = -V_0$ auf alle Ewigkeit in Ruhe. Für $-V_0 < W < 0$ läuft ein klassisches Teilchen wie ein Ping-Pong-Ball zwischen den Wänden des Potentials hin und her.

Quantenmechanisch erwartet wir für die gebundenen Lösungen:

- Energieeigenwerte $W_i < 0$,
- eine im Unendlichen verschwindende Wellenfunktion.

Für die mathematische Beschreibung der Wellenfunktionen werden wir das Potential in drei Bereiche unterteilen und dann entsprechend unserer bisherigen Kenntnisse Lösungsansätze versuchen müssen.



Für den Bereich II setzen wir ähnlich wie beim unendlichen Potentialtopf eine Überlagerung von nach rechts und nach links laufender Welle an:

$$\psi(x) = A_{II}^+ \exp(jkx) + A_{II}^- \exp(-jkx) \quad 2.6-8$$

Ein solcher Ansatz wird für den Bereich II eine Lösung erbringen. Nun stellt sich die Frage, welcher Art die Wellenfunktion in den Bereichen I und III ist. Da wir fordern, dass die Wellenfunktion im Unendlichen verschwinden soll, kommen ebene Wellen nicht in Frage. Wir halten aber mit dem Ansatz in Glg. 2.6-8 nur dann Lösungen, die asymptotisch gegen Null gehen, wenn wir $k=j\kappa$ imaginär wählen. Dann wird der Exponent der Exponentialfunktion reell und wir erhalten keine ebene Wellen sondern bei geeigneter Wahl der Koeffizienten nach aussen asymptotisch gegen Null laufende Exponentialfunktionen.

Wir setzen für die Wellenfunktionen in den Außenbereichen also an:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_I \exp(\kappa x) \\ \psi_{III}(x) &= A_{III} \exp(-\kappa x), \end{aligned} \quad 2.6-9$$

und haben hierbei für den Bereich I schon eine nach links zerfallende bzw. für den Bereich III eine nach rechts asymptotisch gegen Null laufende Funktion gewählt.

Gehen wir mit diesem Ansatz in die Schrödinger-Gleichung für den Bereich I, so ergibt sich:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} A_I \exp(\kappa x) = -\frac{\hbar^2}{2m} A_I \kappa^2 \exp(\kappa x) = W A_I \exp(\kappa x), \quad 2.6-10$$

und damit wieder ähnlich zur Dispersionsrelation beim freien Elektron ein Zusammenhang zwischen der Energie W des Zustandes und dem Parameter κ , der als Parameter die räumliche Struktur der e-Funktion bestimmt. Es muss gelten:

$$\kappa^2 = -\frac{2mW}{\hbar^2} \text{ bzw. } \kappa = \sqrt{-\frac{2mW}{\hbar^2}}.$$

2.6–11

Die Rechnung für den Bereich III führt zu demselben Ergebnis, da bei der zweifachen Ableitung das Minuszeichen wegfällt. Es gibt also zunächst einmal im Außenbereich unendlich viele Lösungen von exponentiell abfallenden Wellenfunktionen. Beispielhaft zeigt die nachfolgende Abbildung zwei mögliche Lösungen.

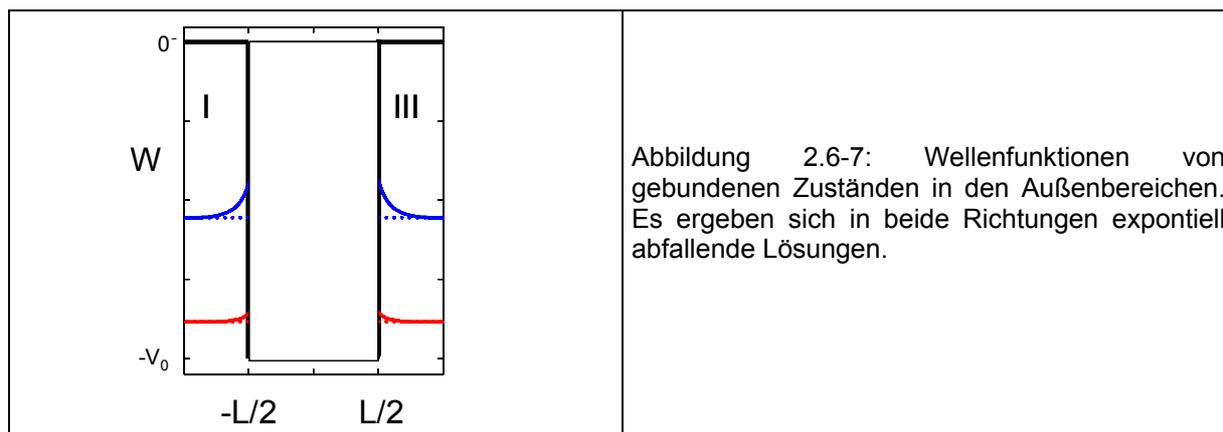


Abbildung 2.6-7: Wellenfunktionen von gebundenen Zuständen in den Außenbereichen. Es ergeben sich in beide Richtungen exponentiell abfallende Lösungen.

Es zeigt sich an dieser Stelle schon ein qualitativer Unterschied zwischen dem klassischen Fall und der Situation in der Quantenmechanik. Die quantenmechanische Wellenfunktion ist in dem klassisch für ein Teilchen mit der Energie $W < 0$ verbotenen Bereich $|x| > \frac{L}{2}$ nichtverschwindend. Das Elektron kann sich also mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch außerhalb des Topfes befinden. Dieses Eindringen in eine eigentlich energetisch nicht erlaubte Barriere wird als „hineintunneln“ bezeichnet und ist das erste Auftreten eines bedeutenden Effektes der Quantenmechanik, nämlich dem Tunneleffekt.

Als Zwischenergebnis ergeben sich damit zunächst einmal unendlich viele Lösungen der Wellenfunktionen. Bei einer vorgegebenen Energie W gilt für die Wellenfunktion:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I \exp(\kappa x) & : x \leq -L/2 \\ A_{II}^+ \exp(jkx) + A_{II}^- \exp(-jkx) & : -L/2 < x < L/2 \\ A_{III} \exp(-\kappa x) & : x \geq L/2 \end{cases} \quad 2.6-12$$

Hierbei gilt dann für den Zusammenhang zwischen k, κ , und W :

$$k^2 = \frac{2m(W + V_0)}{\hbar^2} \text{ im Bereich II und} \quad 2.6-13$$

$$\kappa^2 = -\frac{2mW}{\hbar^2} \text{ in den Bereichen I und III.}$$

Aus diesen unendlichen vielen Wellenfunktionen, die die Schrödinger-Gleichung bei einer vorgegebenen Energie W für die einzelnen Bereich I, II und III lösen müssen wir jetzt noch diejenigen Lösungen herauspicken, die auch die Stetigkeitsbedingungen an den Grenzen zwischen den Bereichen erfüllen.

Die Stetigkeitsbedingungen lauten

$$\begin{aligned} \psi_I(-L/2) &= \psi_{II}(-L/2) & \psi_I'(-L/2) &= \psi_{II}'(-L/2) \\ \psi_{II}(L/2) &= \psi_{III}(L/2) & \psi_{II}'(L/2) &= \psi_{III}'(L/2) \end{aligned} \quad 2.6-14$$

und selektieren aus der Vielfalt der möglichen Lösungen einige wenige diskrete Wellenfunktionen heraus.

Die vier Stetigkeitsbedingungen ergeben ein Gleichungssystem von vier Gleichungen für die vier Parameter A_I, A_{II}^+, A_{II}^- und A_{III} . Damit sind wir wieder in der Situation wie beim unendlichen Potentialtopf und haben die Lösung der Differentialgleichung auf ein lineares Gleichungssystem zurückgeführt. Im Prinzip können wir nun nach dem Prinzip

- Gleichungssystem hinschreiben
- Determinante der Koeffizientenmatrix = 0 setzen

vorgehen. Für „echte“ Probleme (mit komplizierteren Potentialverläufen) wird man das Ganze nun mit dem Computer lösen und diejenigen k 's und κ 's bestimmen, die mit den Stetigkeitsbedingungen im Einklang sind.

Für den Fall des endlichen Potentialtopfes kann man auch analytisch noch etwas weiter rechnen. Es ergeben sich aus der etwas länglichen Rechnerei Bedingungen für den Zusammenhang von k und κ :

$$\begin{aligned} \kappa &= k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) \text{ für symmetrische Lösungen } \psi \text{ (cosinusartig)} \\ \kappa &= -k \cot\left(\frac{kL}{2}\right) \text{ für antisymmetrische } \psi \text{ (sinusartig)} \end{aligned} \quad 2.6-15$$

Weiterhin folgt aus Gleichung 2.6-13:

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv C_0. \quad 2.6-16$$

Aus der Vielfalt der k 's und κ 's werden durch diese Gleichungen diejenigen ausgewählt, die mit den Stetigkeitsbedingungen im Einklang sind. Die erhaltenen transzendenten Gleichungen können relativ anschaulich graphisch gelöst werden

und es ergeben sich auf diese Weise noch ein einige weitere Einsichten, die von grundlegender Natur sind. Die folgende Abbildung veranschaulicht die Gleichungen:

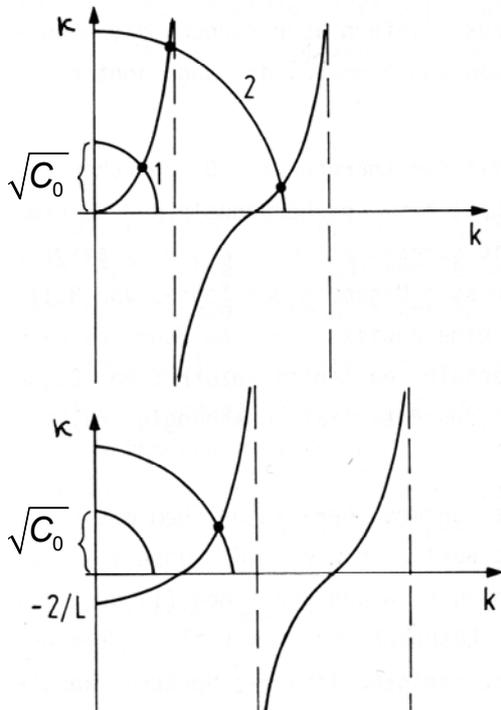


Abbildung 2.6-8: Graphische Lösung der Gleichungen für k und κ .

Gleichung 2.6-16 ist eine Gleichung für eine Kreislinie in der k, κ -Ebene mit dem Radius $\sqrt{C_0}$. Die *symmetrischen* Lösungen ergeben sich aus dem Schnittpunkt der Kreislinie mit der Funktion $\kappa = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$. Auf alle Fälle (also auch für sehr flache Töpfe) gibt es bei endlichem V_0 einen Schnittpunkt und damit eine gebundene Lösung. Je energetisch tiefer der Potentialtopf ist, desto mehr Lösungen existieren, da dann die Kreislinie mehrere Äste der modifizierten Tangens-Funktion schneidet.

Ein etwas anderes Verhalten ergibt sich für die *antisymmetrischen* Lösungen. Die Funktion $\kappa = -k \cot\left(\frac{kL}{2}\right)$ strebt für $k \rightarrow 0$ gegen $\kappa = -\frac{2}{L}$. Damit muss der Potentialtopf eine gewisse Mindesttiefe haben, so dass es für positive κ einen Schnittpunkt mit der Funktion ergibt. Diese hier als mathematische Merkwürdigkeit erscheinende Eigenschaft gilt ganz generell bei symmetrischen Potentialtöpfen also nicht nur bei den hier angenommen rechteckigen Töpfen: Im symmetrischen Potentialtopf gibt es auf alle Fälle eine gebundene symmetrische Lösung; eine antisymmetrische Lösung hingegen existiert erst ab einer gewissen Mindesttiefe des Potentialtopfes.

Insgesamt ergeben sich damit je nach Tiefe des Potentialtopfes mindestens eine Wellenfunktion der Art

$$u_{g,i}(x) = \begin{cases} A \cos(k_i x) & \text{für } |x| \leq \frac{L}{2} \\ A \cos(k_i \frac{L}{2}) \exp\left(\kappa_i (\frac{L}{2} - |x|)\right) & \text{für } |x| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad 2.6-17$$

Ab einer genügenden Tiefe des Potentialtopfes ergibt sich dann eine oder bei größerer Tiefe auch mehrere Lösungen, die antisymmetrisch sind:

$$u_{u,i}(x) = \begin{cases} B \sin(kx) & \text{für } |x| \leq \frac{L}{2} \\ B \sin(k_i \frac{L}{2}) \exp\left[\kappa_i (\frac{L}{2} - |x|)\right] & \text{für } x > \frac{L}{2} \\ -B \sin(k_i \frac{L}{2}) \exp\left[\kappa_i (\frac{L}{2} - |x|)\right] & \text{für } x < -\frac{L}{2} \end{cases} \quad 2.6-18$$

Die folgende Abbildung zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, also die Betragsquadrate der Wellenfunktionen, für den Fall eines Potentialtopfes mit einer Tiefe von 2 eV und einer Breite von 1 nm. In diesem speziellen Fall existiert genau eine symmetrische und eine antisymmetrische Lösung.

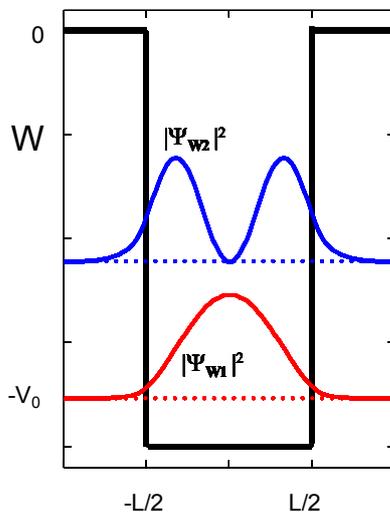


Abbildung 2.6-9: Darstellung des Betragsquadrates der Wellenfunktionen zu den beiden gebundenen Lösungen in einem endlichen Potentialtopf der Tiefe $V_0=2$ eV und einer Breite von 1 nm.

Zusammenfassend kann festgehalten werden:

- Es ergeben sich aufgrund der Stetigkeitsbedingungen nur Lösungen für diskrete Energieniveaus.
- Die Anzahl der gebundenen Zustände beim symmetrischen Potentialtopf ist mindestens eins aber bei endlicher Tiefe endlich.

- Genau wie beim unendlichen Potentialtopf sind die Lösungen nach Energie geordnet abwechselnd symmetrisch und antisymmetrisch.
- Die Lösungen sind im Innern des endlichen Potentialtopfes ganz ähnlich wie im Fall des unendlichen Potentialtopfes, jedoch ragen die Wellenfunktionen an den Rändern in den klassisch verbotenen Bereich hinein.

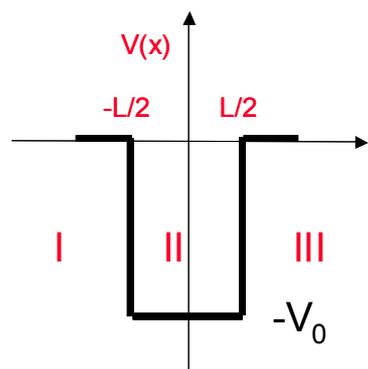
2.6.4. Kontinuumslösungen

Wenden wir uns nun dem Fall der delokalisierten sogenannten Kontinuumslösungen zu, also der Situation, die sich ergibt, wenn die Energie des Elektrons groß genug ist, um den Potentialtopf zu verlassen. Wir erwarten dafür Lösungen, die eine große Ähnlichkeit zu den frei propagierenden ebenen Wellen aus Kapitel 1 haben. Machen wir uns wieder das klassische Verhalten klar: Ein klassischer Massepunkt, mit einer nicht verschwindenden kinetischen Energie würde an dem einen Rand des Potentialtopfes durch einen Kraftstoß beschleunigt, er bekäme V_0 als zusätzliche kinetische Energie hinzu, würde mit vergrößerter Geschwindigkeit durch das Gebiet des Potentialtopfes laufen und dann am gegenüberliegenden Rand durch einen Kraftstoß wieder auf seine ursprüngliche Geschwindigkeit abgebremst werden und dann gleichförmig im Außenbereich sich weiter bewegen.

Quantenmechanisch wird aus der räumlich exponentiell gedämpften Wellenfunktion

$\psi(x) = A \exp\left[\kappa\left(\frac{L}{2} - |x|\right)\right]$ wieder eine propagierende Materiewelle der Art

$\psi(x) = A^+ \exp(jkx) + A^- \exp(-jkx)$. Man erhält als Lösungen wieder Wellenfunktionen mit echtem Wellencharakter in allen Bereichen I, II und III. Die Wellenzahlen in den einzelnen Bereichen berechnen sich gemäß der Dispersionsrelation für ein freies Teilchen:



$$k_I = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(W + V_0)}{\hbar^2}}$$

$$k_{III} = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

Abbildung 2.6-10: Schema eines endlichen Potentialtopfes in der in den meisten Lehrbüchern üblichen Darstellung, in der der Potentialtopf symmetrisch rund um den Nullpunkt liegt.

Glg. 2.6–19

Die Lösungen hängen nun stark von den vorgegebenen Randbedingungen ab (z.B. Teilchen laufen nur von links oder von rechts ein o. ä.). Die in Glg. 2.6-19 angegebenen Ausdrücke für die Wellenvektoren gelten allerdings davon unabhängig. Qualitativ können die Wellen wie in Abbildung 2.6-11 gezeigt visualisiert werden.

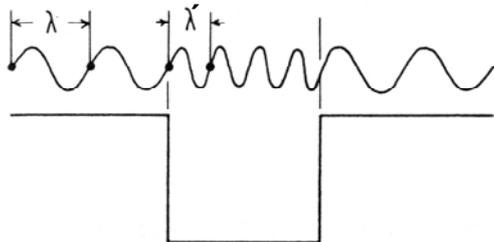


Abbildung 2.6-11: Qualitatives Bild der Kontinuumslösungen am endlichen Potentialtopf.

In den Außenbereichen ist die Wellenzahl gleich groß, dementsprechend gilt dies auch für die zugehörige Wellenlänge λ . Im Bereich des Potentialtopfes ist die Wellenzahl k_{II} größer, dementsprechend ist die Wellenlänge λ' in diesem Bereich kleiner.

Für die allgemeine Lösung des Problems würde man jetzt wieder einen Ansatz gemäß

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I^+ \exp(jkx) + A_I^- \exp(-jkx) & : x \leq -L/2 \\ A_{II}^+ \exp(jk'x) + A_{II}^- \exp(-jk'x) & : -L/2 < x < L/2 \\ A_{III}^+ \exp(jkx) + A_{III}^- \exp(-jkx) & : x \geq L/2, \end{cases} \quad 2.6-20$$

mit $k = k_I = k_{III}$ und $k' = k_{II}$

machen.

Interessant sind aber nun eigentlich weniger die ganz allgemeinen Lösungen, sondern es ist eher der Spezialfall relevant, dass von einer Seite ein Elektron bzw. Elektronen einfallen und man interessiert sich ähnlich wie bei elektromagnetischen Wellen, die z.B. durch ein transparentes Dielektrikum laufen für die *Transmissions-* und *Reflexionskoeffizienten*.

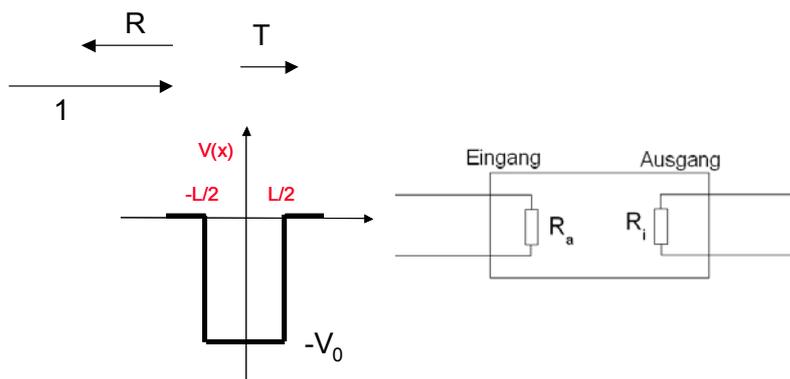


Abbildung 2.6-12: Links: Eine von links einfallende Materiewelle mit der Amplitude 1 wird teilweise reflektiert und teilweise durch den Potentialtopf transmittiert. Mitte: Schema eine Vierpols.

Das Vorgehen ist ganz analog zur Vierpoltheorie bei elektromagnetischen Phänomenen. Man interessiert sich für das quantenmechanische *Übertragungsverhalten* des „Bauelementes“ Potentialtopf. Klassisch ist dies ein triviales Problem. Wie oben schon diskutiert, läuft das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit $T=1$ durch den Bereich des Potentialtopfes, die Wahrscheinlichkeit für die Reflexion ist $R=0$.

Nehmen wir eine, wie in Abbildung 2.6-12 dargestellt, von links einlaufende Materiewelle, so gilt $A_{III}^- = 0$, da im Bereich III keine nach links laufende Welle vorhanden ist. Die gesuchten Koeffizienten für die Transmission und Reflexion ergeben sich dann gemäß:

$$T = \frac{|A_{III}^+|^2}{|A_I^+|^2}; \quad R = \frac{|A_I^-|^2}{|A_I^+|^2}. \quad 2.6-21$$

Für die Berechnung der Koeffizienten müssen nun zunächst die Gleichungen 2.6-20 gelöst werden. Dies ist im Prinzip simpel aber wiederum eine üble Rechnerei und wir überlassen dieses entweder anderen Leuten oder unserem Computer. Hierfür kann z. B. das unter

<http://www.abdn.ac.uk/physics/vpl/well/applet.html>

verfügbare Java-Applet eingesetzt werden.

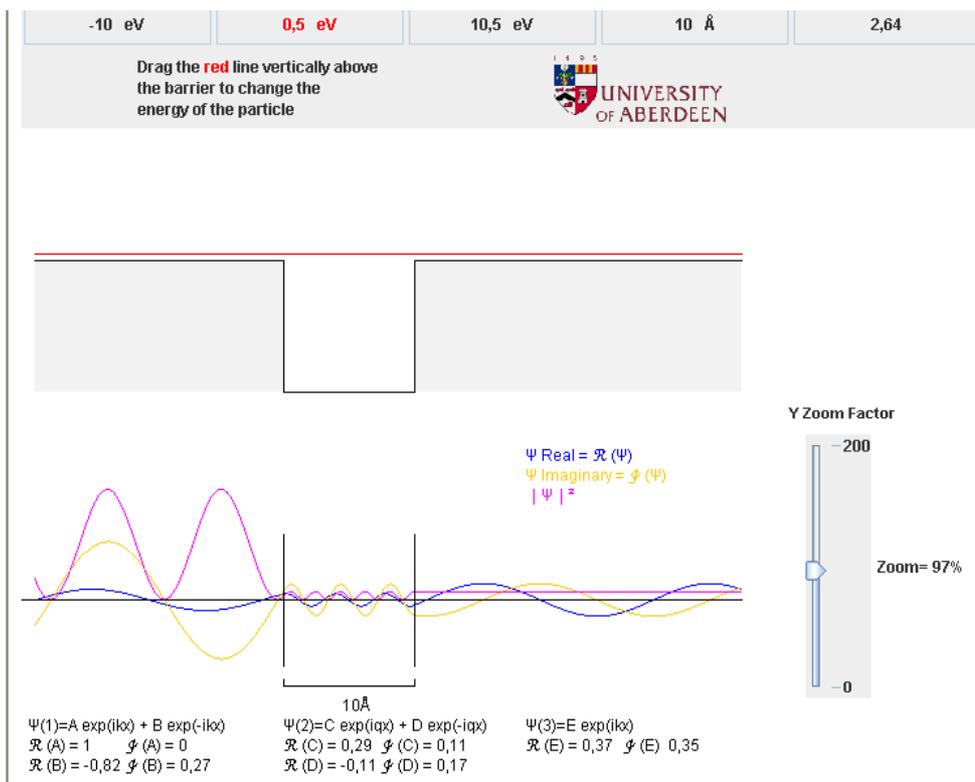
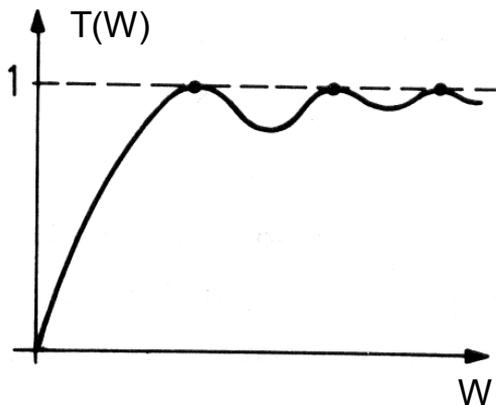


Abbildung 2.6-13: Darstellung der Wellenfunktionen bei einer von links auf einen Potentialtopf treffenden Materiewelle. Die Welle wird teilweise reflektiert und teilweise transmittiert (Screenshot von <http://www.abdn.ac.uk/physics/vpl/well/applet.html>).

Die Abbildung 2.6-13 zeigt das Verhalten für ein Elektron, das mit einer Energie $W=0.5$ eV auf einen 1 nm breiten und 10 eV tiefen Potentialtopf trifft. Die magentafarbene Linie visualisiert hierbei das Betragsquadrat der Wellenfunktion. Die von links einfallende Welle wird im Gegensatz zum klassischen Fall teilweise am Potentialtopf reflektiert und es bildet sich links vom Potentialtopf eine stehende Welle aus. Dies zeigt sich in einer räumlich modulierten Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Im Potentialtopf selbst gibt es ebenso stehende Wellen. Im Bereich III rechts vom Potentialtopf erhalten wir keine stehende sondern nur eine nach rechts laufende Welle mit einem räumlich konstanten Betragsquadrat.

Für den Wert des Transmissionskoeffizienten ergibt sich nach längerer Rechnerei:



$$T(W > 0) = \left(1 + \frac{\sin^2 \left(L \sqrt{\frac{2m(W + V_0)}{\hbar^2}} \right)}{4 \left(\frac{W}{V_0} \right) \left(\frac{W}{V_0} + 1 \right)} \right)^{-1}$$

$$= \left(1 + \frac{\sin^2(Lk')}{4 \left(\frac{W}{V_0} \right) \left(\frac{W}{V_0} + 1 \right)} \right)^{-1}$$

Abbildung 2.6-14: Grafische Darstellung der Formel für den Transmissionskoeffizienten in Glg. 2.6-22.

Glg. 2.6–22

Im Gegensatz zum gestrichelt dargestellten klassischen Verhalten steigt der Transmissionskoeffizient langsam an und zeigt dann für steigende Energien immer näher beieinanderliegende und weniger durchmodulierte Resonanzen. Die maximale Transmission 1 wird erreicht für $Lk' = n\pi$, also immer genau dann, wenn eine ganzzahlige Vielfaches der halben Materiewellenlänge in den Potentialtopf hineinpasst.

Die Analogie zum Potentialtopf ist bei den elektromagnetischen Wellen das in der Optik gebräuchliche Fabry-Perot-Etalon. Durch die sich einstellende Stetigkeit der Tangentialkomponenten von E- und H-Feld kommt es ebenfalls zu reflektierten und transmittierten Anteilen bei einer einfallenden Welle. Es bilden sich dann ähnlich wie im Potentialtopf stehende Wellen aus und nur bei konstruktiver Interferenz, die sich einstellt, wenn genau ein Vielfaches der halben Wellenlänge in die dielektrische Schicht hineinpasst kommt es zu einer vollständigen Transmission.

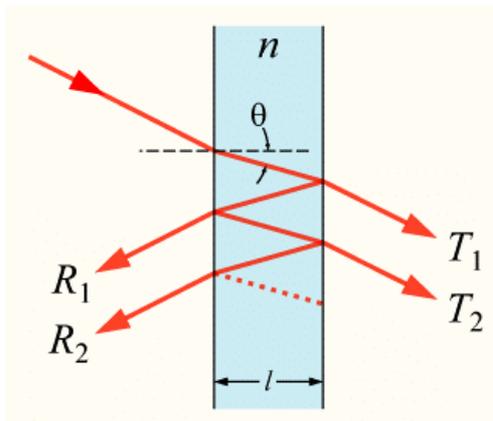


Abbildung 2.6-15: Funktionsprinzip eines Fabry-Perot-Etalons für elektromagnetische Wellen. Zur Veranschaulichung der Interferenzeffekte fällt die em. Welle schräg ein. Zur konstruktiven Interferenz kommt es, wenn die einzelnen transmittierten, bzw. reflektierten Teilwellen mit derselben Phase in eine Richtung laufen.

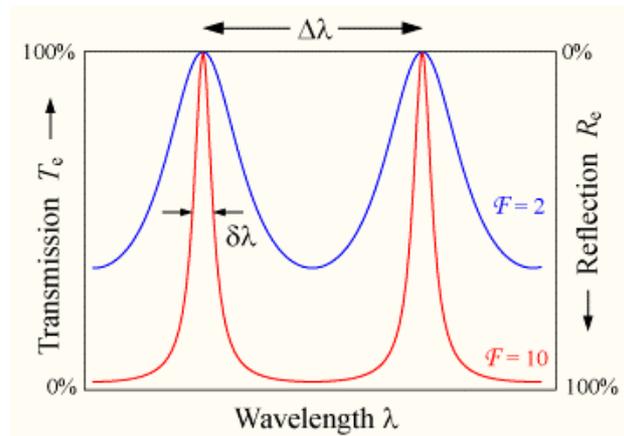


Abbildung 2.6-16: Transmission eines optischen Fabry-Perot-Etalons als Funktion der Wellenlänge. Nur für bestimmte Wellenlängen wird die Transmission 1 erreicht.