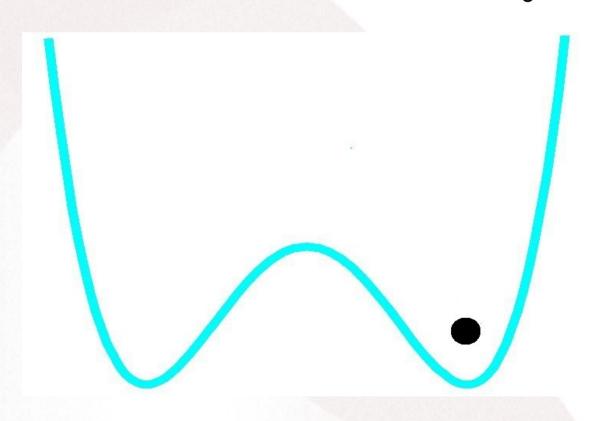
Kohärentes Tunneln

Doppeltopfpotential mit Beispiel am Ammoniakmolekül (NH₃)



Lisa Haag, Sabrina Kröner

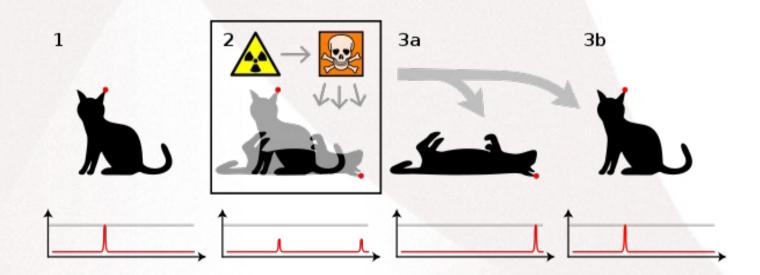
Gliederung

- Schrödingers Katze
- Doppeltopfpotential
 - Energieniveaus
 - Dynamik eines Wellenpakets
 - Kohärentes Tunneln
 - Hamiltonoperator
- Ammoniakmolekül

Schrödingers Katze

Gedankenexperiment von Erwin Schrödinger (1935), das Unvollständigkeit der Quantenmechanik aufzeigen soll.

Das System kann auch als Zweizustandssystem beschrieben werden.



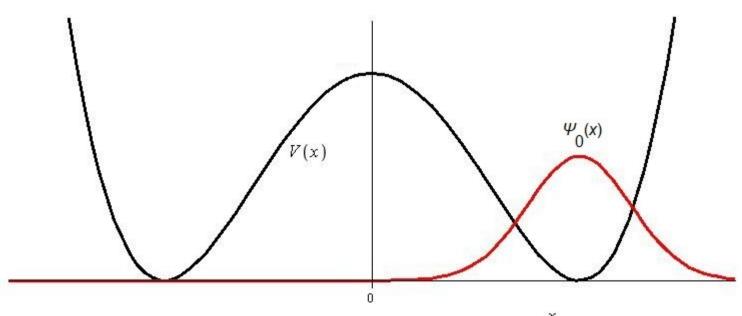
Doppeltopfpotential

Eigenschaften des Doppeltopfpotentials

- Endliche Potentialbarriere
- Unendlich hohe Potentialwände
- Näherung durch zwei harmonische Oszillatoren

Tunneln nicht möglich

- → Teilchen in einer Mulde
- \rightarrow Grundzustand $\Psi_0(x)$ mit $E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2}$
- → Zweifache Entartung



__ite 5

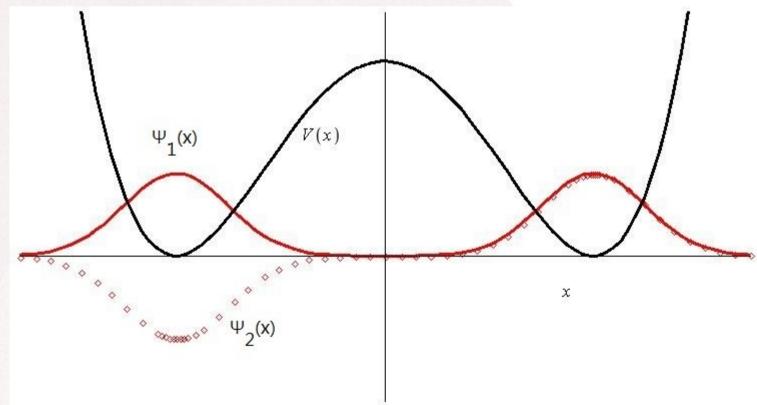
Jetzt: Tunneln erlaubt

Eigenzustände:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_0(\mathbf{x}) + \Psi_0(-\mathbf{x}) \right)$$

$$\Psi_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{0}(x) + \Psi_{0}(-x))$$

$$\Psi_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{0}(x) - \Psi_{0}(-x))$$



Schrödinger Gleichungen:

$$\Psi_0'' + \frac{2m}{\hbar} (E_0 - V) \Psi_0 = 0$$
 (1)

$$\Psi_{1}'' + \frac{2m}{\hbar} (E_{1} - V) \Psi_{1} = 0$$
 (2)

Aus $\int_{0}^{\infty} (1) \cdot \Psi_{1} - (2) \cdot \Psi_{0} dx$ und analoger Betrachtung mit

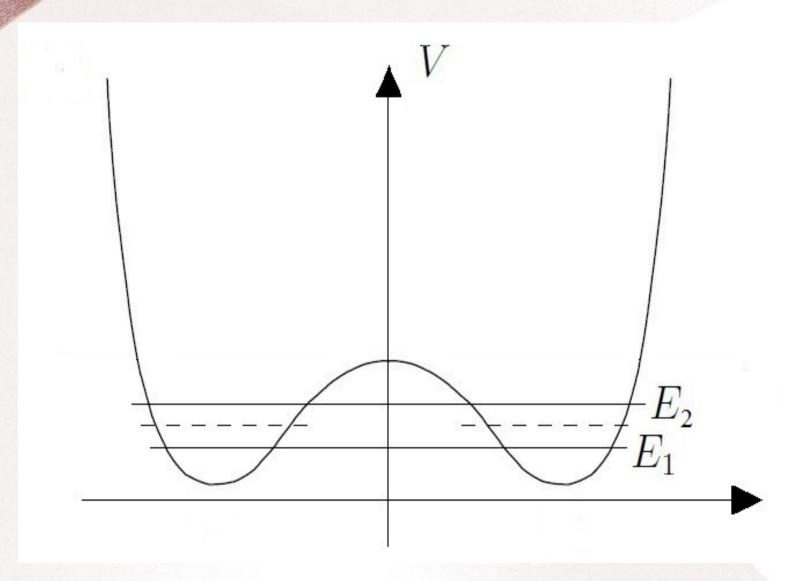
Ψ₀ und Ψ₂ können die Energien auf die Form

$$E_1 = \frac{\hbar \omega_0}{2} - \frac{\hbar}{2} \Delta$$

$$E_2 = \frac{\hbar \omega_0}{2} + \frac{\hbar}{2} \Delta$$

gebracht werden.

Daher folgt die Aufhebung der Entartung



Dynamik eines Wellenpakets

Annahme: Teilchen hält sich zum Zeitpunkt t=0 in der rechten Mulde auf

$$\rightarrow |\Psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle)$$

Für die Zeitentwicklung gilt

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} |\Psi_R\rangle$$

mit den Eigenwerten des Hamiltonoperators E₁ & E₂ erhält man

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{-i\omega_0 t}{2}} \left[e^{\frac{it\Delta}{2}} |\Psi_1\rangle + e^{\frac{-it\Delta}{2}} |\Psi_2\rangle \right]$$

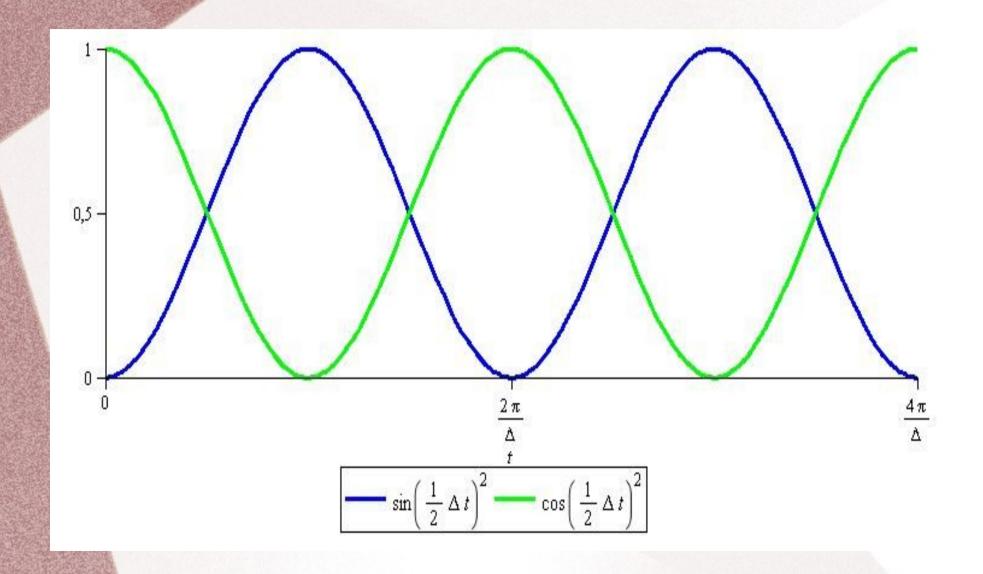
Kohärentes Tunneln

Die Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand $\Psi_R(0)$ angenommen wird, ist

$$|\langle \Psi_R | \Psi(t) \rangle|^2 = \cos^2 \left(\frac{t \Delta}{2} \right)$$

Analog kann man die Wahrscheinlichkeit für die linke Mulde berechnen

$$|\langle \Psi_L | \Psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 \left(\frac{t \Delta}{2} \right)$$



Hamiltonoperator

H in der Basis $|\Psi_1\rangle$ und $|\Psi_2\rangle$

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}I - \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_z = \begin{vmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{\hbar\Delta}{2} & 0\\ 0 & \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\Delta}{2} \end{vmatrix}$$

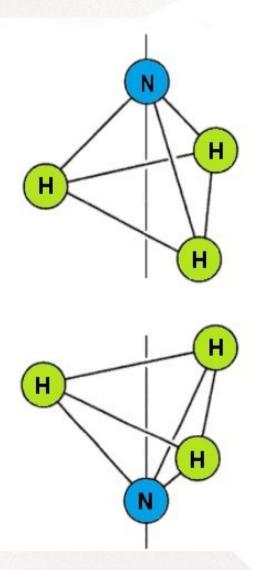
H in der Basis $|\Psi_L\rangle \& |\Psi_R\rangle$

$$|\Psi_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad |\Psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

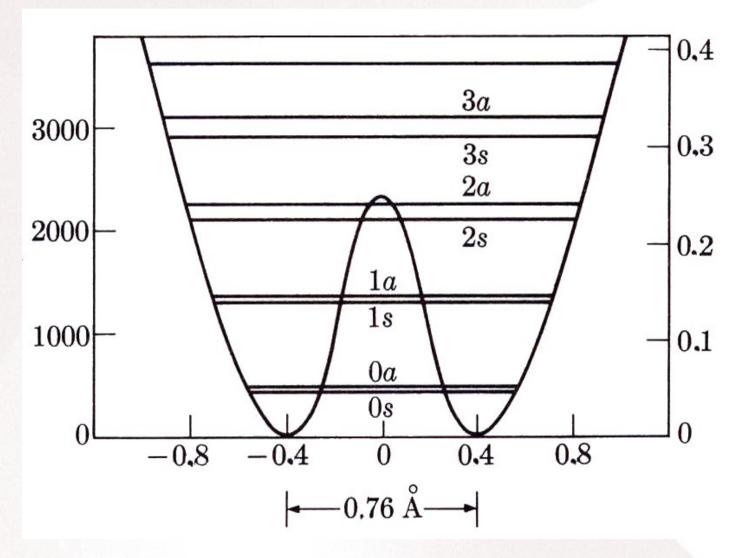
$$H = \frac{\hbar \omega_0}{2} I - \frac{\hbar \Delta}{2} \sigma_x = \begin{bmatrix} \frac{\hbar \omega_0}{2} & \frac{-\hbar \Delta}{2} \\ \frac{-\hbar \Delta}{2} & \frac{\hbar \omega_0}{2} \end{bmatrix}$$

Ammoniakmolekül

- NH₃
- 2 Konfigurationen möglich
- Beschreibung durch Doppeltopfpotential



Energieaufspaltung im Experiment messbar



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Quellen

Coherent tunnelling: On the level splitting of local ground states in a bistable potentials – H. Dekker (1986)

Instability of tunnelling and the concept of molecular structure in quantum mechanics: The case of pyramidal molecules and enantiomer problem – P. Claverie, G. Jona-Casimio (1986)

Macroscopic Quantum Coherence – R.A. Paju (2001)

Quantenmechanik Teil 1 – C. Cohen-Tannoudji

Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd. 3, Quantenmechanik – Landau-Lifschitz