Lösungen zur Übung 2.2-5

Lösung der Schrödingergleichung für eine Potentialstufe

Illustration

1. Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet **(1)**?

Da hier **V(*x*) = 0** ist, wird die eindimensionale Schrödinger-Gleichung des Teilchens in Gebiet **(1)** einfach

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi_1 = 0$$

2. Zeige, daß $\psi_1(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp -(ikx)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet **(1)** ist.

- ***A*** und ***B*** sind von **0** verschiedene Konstanten, und **i** ist die imaginäre Einheit; $i^2 = -1$.

Zweifaches Ableiten dieser Wellenfunktion liefert:

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx) \\
\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} &= -k^2 \cdot A \cdot \exp(ikx) - k^2 \cdot B \cdot \exp(-ikx) \\
&= -k^2 \cdot \psi_1(x)
\end{aligned}$$

- Dieses Ergebnis wird in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Wir erhalten dann das folgende Resultat:

$$\begin{aligned}
-k^2 \cdot \psi_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi_1(x) &= 0 \\
-k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E &= 0
\end{aligned}$$

- Das ist eine Bedingung für die Größe ***k***: Der gemachte Ansatz ist also *nur dann* eine Lösung falls gilt:

$$k = \pm \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \right)^{1/2} = \frac{(2m \cdot E)^{½}}{\hbar} = \frac{(m^2 \cdot v^2)^{½}}{\hbar}$$

$$k = \frac{p}{\hbar} := \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Dabei haben wir von folgenden Beziehungen Gebrauch gemacht:
  - Die Gesamtenergie *muß* ausschließlich kinetisch sein - das Potential ist ja **= 0** - also gilt $E = ½mv^2$.
  - Der durch Einsetzen erhaltene Ausdruck m^2v^2 ist natürlich das Quadrat des Impulses ***p***.
  - Die de Broglie Beziehung sagt uns, daß $p/\hbar = 2\pi/\lambda$, das ergibt die letzte Gleichung.
- Damit können wir die Zusatzfrage angehen:

Was wird durch ***k*** physikalisch beschrieben? *Hinweis:* Beachte die *Dimension* und die allgemeine Form der Lösung (verwende den Eulerschen Satz).

- $\psi_1(x)$ löst die Schrödingergleichung für geignet gewählte Parameter. Schreibt man die komplexen Exponentialfunktionen mit Hilfe der Eulerschen Beziehung aus, ergibt sich eine Folge von **sin** und **cos** Funktionen mit dem Argument $k \cdot x$.
  - Wie auch immer es genau aussieht, das ist etwas wellenartiges, und k ist bis auf das 2π so etwas wie die Wellenzahl $1/\lambda$, weiter bis bis auf das $\hbar$ der Impuls $p = mv$ - und sogar die Energie E steckt codiert in k.
  - Es ist schlicht die beherrschende Größe, in der alle Eigenschaften des Teilchens stecken!
  - In drei Dimensionen ist k ein *Vektor*, man nennt es den **Wellenvektor** des Teilchens; mit ihm haben wir einen zentralen Begriff der Quantentheorie kennengelernt.

- **3.** Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet **(2)**?
  - In Gebiet (2) gilt $V(x) = V_0$. Die Lösung der Schrödingergleichung des Teilchens lautet hier also:

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2 = 0$$

- **4.** Zeige, daß $\psi_2(x) = C \cdot \exp -(\alpha \cdot x)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet **(2)** ist.
  - C ist wieder eine von null verschiedene Konstante und für α gilt, wie sich gleich zeigen wird:

$$\alpha^2 = \frac{2m \cdot (V_0 - E)}{\hbar^2}$$

- Zweifaches Ableiten der vorgeschlagenen Wellenfunktion $\psi_2(x) = C \cdot \exp -(\alpha \cdot x)$ liefert hier:

$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= C \cdot \exp(-\alpha x) \\ \frac{\partial^2\psi_2(x)}{\partial x^2} &= \alpha^2 \cdot C \cdot \exp(-\alpha x) \\ &= \alpha^2 \cdot \psi_2(x) \end{aligned}$$

  - Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung für Gebiet **(2)** führt dann auf:

$$\alpha^2\psi_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2(x) = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

  - q.e.d.

5. Berechne die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_2(x)|^2$ des Teilchens in Gebiet **(2)** und vergleiche das Ergebnis mit der Erwartung für ein *klassisches* (nicht quantenmechanisches) Teilchen.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeits(dichte) eines Teilchens am Ort x wird durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion an dieser Stelle gegeben. Für Gebiet **(2)** lautet sie hier:

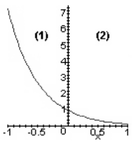
$$|\psi_2(x)|^2 = C^2 \cdot \exp(-2\alpha x) = C^2 \cdot \exp[-2x \cdot \{(2m/\hbar^2) \cdot (V_0 - E) \cdot\}^{1/2}]$$

- Da $V_0 > E$ vorausgesetzt wird, ist α reell und wir haben schlicht eine abklingende Exponentialfunktion.

Was würden wir für ein *klassisches* Teilchen erwarten? Zum Beispiel für eine Kanonenkugel, die auf einen Tafelberg zufliegt, mit einer Flughöhe die kleiner ist als die Berghöhe?

Für klassische Teichen erwarten wir einfach perfekte Reflektion: *Niemals*, auch nicht einmal ansatzweise, ist das Teilchen im Bereich **(2)** zu finden.

- Unser quantenmechanische Teilchen kann jedoch mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit nach Maßgabe der obigen Formel im Bereich **(2)** gefunden werden! Es kann in Bereiche eindringen, die klassischen Teilchen vollständig verwehrt sind.
- Die folgende Graphik zeigt schematisch wie das aussieht (für $C = 1$)



- Die Graphik zeigt auch wie diese Lösung im Bereich **(1)** aussehen würde, wo sie aber keinen Sinn ergibt (siehe unten)!

6. Was könnte passieren, wenn statt einer Potentialschwelle eine dünne Barriere genommen wird?

Falls der Potentialsprung z.B nach $x = 0{,}5$ in obiger Graphik "zu Ende" ist, d.h. wir eine Potentialbarriere der Höhe V_0 und Breite **0,5** hätten, dann hätten wir eine *endliche* Wahrscheinlichkeit, das Teilchen auf der *anderen* Seite der Barriere zu finden: es kann durch die Barriere **durch"tunneln"**.

- Klassisch würde das bedeuten, daß Kanonenkugeln, die man gegen eine Mauer schießt gelegentlich auf der andern Seite auftauchen - *ohne* daß die Mauer ein Loch hat!

7. Warum macht die Lösung $\psi_1'(x) = C' \cdot \exp(-\alpha x)$ für Gebiet **(1)** physikalisch keinen Sinn (selbst wenn wir einen anderen Vorfaktor **C'** nehmen)?

$\psi_1'(x) = C' \cdot \exp - \alpha \cdot x$ macht als Lösung für Gebiet **(2)** keinen Sinn, da $\psi_1'(x)$ *nicht geeignet normiert werden kann*:

$$1 \neq \int_0^\infty |\psi_1'(x)|^2 \cdot dx$$

- Das ist auch sofort aus der Graphik ersichtlich. Wir brauchen *andere* Lösungen; eben die komplexe oben gegebene Funktion.

8. Welcher Grenzfall führt bei diesem Problem auf das klassische Ergebnis?

Obwohl es klassische Teilchen gar nicht gibt, wird der **Tunneleffekt** bei "normalen" Verhältnissen *nie* beobachtet. Es ist jetzt auch leicht zu sehen warum:

- Um das klassische Ergebnis zu erhalten, muß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_2(x)|^2 \Rightarrow 0$ gehen. Dies können wir auf *zwei* Weisen erreichen:
- **1.** Indem wir $\alpha \Rightarrow \infty$ laufen lassen. Dies entspricht einer *unendlich hohen* (nicht überwindbaren) Potentialstufe. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in Gebiet **(2)** anzutreffen, ist dann immer gleich null, so daß wir auf das klassische Ergebnis kommen.

Das ist aber nicht sehr befriedigend; wir wollen ja nicht nur bei großen Energiedifferenzen zur klassischen Betrachtung kommen. Besser ist:

- **2.** Die Teilchenmasse wird erhöht. Nehmen wir ein Proton, anstelle eines Elektrons, d.h. rund und roh die **2 000** fache Masse, wird $|\psi_2(x)|^2$ mit $\mathbf{\exp-(2\,000)^{1/2} = 3{,}78 \cdot 10^{-20}}$ multipliziert - spätestens jetzt ist die Wahrscheinlichkeit ziemlich dicht bei Null!

Zurück zur Aufgabe