

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 8

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. In dieser Vorlesung wird das Modell des Potenzialtopfes endlicher Tiefe besprochen. Als Anwendung dieses Modells wird der RAMSAUER-Effekt vorgestellt.

1. DER ENDLICH TIEFE POTENZIALTOPF

Maple-Dateien zur Vorlesung:

- QMV8Pr1.mws (Behandlung der Situation $E > 0$ und $V < 0$)
- QMV8Pr2.mws (Behandlung der Situation $E < 0$ und $V < 0$)
- QMV8Pr3.mws (Numerisches Beispiel zum zweiten Fall)

Wir betrachten in dieser Vorlesung ein Potenzial der folgenden Gestalt:

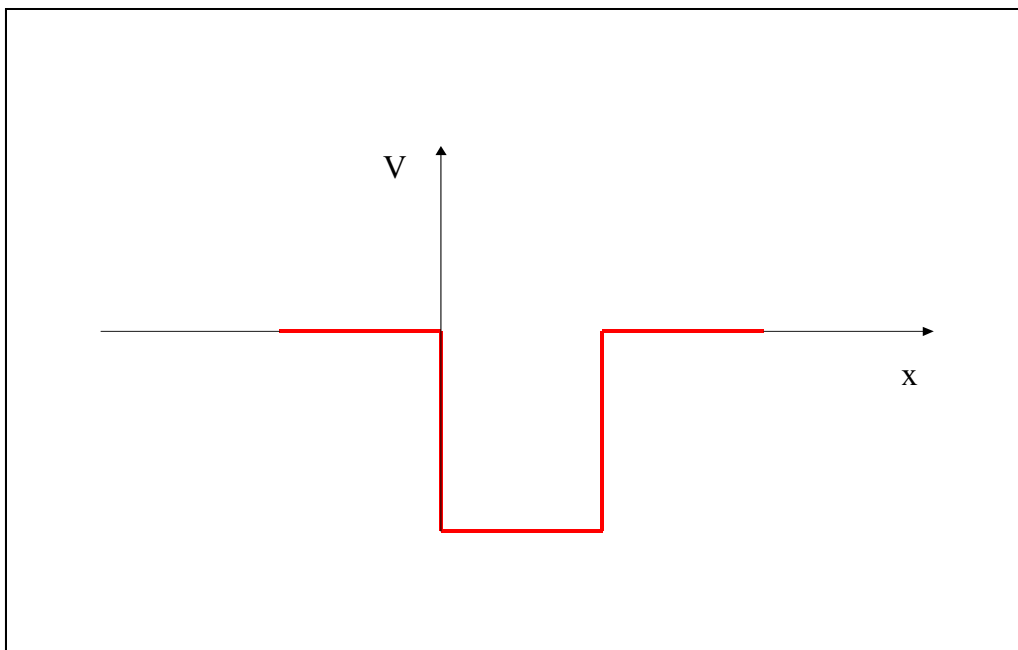


Figure 1: Energiediagramm zum endlich tiefen Potenzialtopf

Wir werden dieses Potenzial als Modell von in einem Metall gebundenen Elektronen verwenden. Wir betrachten nur die eindimensionale Variante, da sie schon die interessanten Aspekte dieses Modells zeigt. Wir werden im folgenden zwei Fälle untersuchen. Zum einen kann die Energie der einfallenden Teilchen positiv sein, dann spricht man von einer Streuung. Zum anderen kann die Energie der einfallenden Teilchen negativ

sein, wir erhalten dann gebundene Lösungen, die dann z.B. Elektronen im Metall beschreiben.

1.1. Fall $E > 0$ und $V < 0$. Wir betrachten in diesem Fall ein Streuproblem. Teilchen mit positiver Energie bewegen sich auf ein negatives Potenzial zu, etwa das Potenzial einer negativen Ladung. Wir beschränken dabei die eigentlich unendlich weitreichende Kraftwirkung¹ auf einen effektiven Bereich, mit geringem Abstand vom Potenzial. Wir bereits gewohnt, betrachten wir nur die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung.

Lösung im Bereich $x < 0$:

In diesem Bereich ist das Potenzial $V = 0$ und wir erhalten die bereits bekannte Lösung:

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \quad (1)$$

wobei die auch schon bekannte Substitution:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2)$$

verwendet wurde.

Lösung im Bereich $0 < x < a$:

In diesem Bereich hat die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung die Gestalt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V_0 \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x) \quad (3)$$

die wir umstellen zu:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0 \quad (4)$$

Da ja nach Voraussetzung $E > 0$ und $V_0 < 0$ gelten soll, ist der folgende Ausdruck reell:

$$q := \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \Rightarrow q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (5)$$

Die Lösung der Gleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + q^2 \cdot \varphi(x) = 0 \quad (6)$$

ist uns bereits bekannt:

$$\varphi_2(x) = A \cdot e^{iqx} + B \cdot e^{-iqx} \quad (7)$$

Physikalisch gesehen gibt es keinen Grund eine Konstante null zu setzen.

¹ Sie fällt natürlich mit wachsendem Abstand sehr stark ab, so dass die Beschränkung auf geringe Entfernungen gerechtfertigt ist.

Lösung im Bereich $x > a$:

In diesem Bereich haben wir die gleiche Lösungsstruktur wie im ersten Bereich. Da von rechts kein Teilchen einfällt, bleibt als Lösung:

$$\varphi_3(x) = T \cdot e^{ikx} \quad (8)$$

Auswertung der Randbedingungen:

Aus der Forderung der Stetigkeit der Wellenfunktion, sowie ihrer ersten Ableitung:

$$\begin{aligned} \varphi_1(0) &= \varphi_2(0) \\ \varphi_2(a) &= \varphi_3(a) \\ \frac{\partial}{\partial x} \varphi_1(0) &= \frac{\partial}{\partial x} \varphi_2(0) \\ \frac{\partial}{\partial x} \varphi_2(a) &= \frac{\partial}{\partial x} \varphi_3(a) \end{aligned} \quad (9)$$

erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} 1 + R - A - B &= 0 \\ ik - iRk - iAq + iBq &= 0 \\ Ae^{iqa} + Be^{-iqa} - Te^{ika} &= 0 \\ iAe^{iqa} - iBe^{-iqa} - iTe^{ika} &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

Mit Maple erhalten wir die folgenden Lösungen:

$$\begin{aligned} R &= \frac{-k^2 + k^2 e^{2iqa} + q^2 - q^2 e^{2iqa}}{-k^2 - 2kq + k^2 e^{2iqa} - 2k e^{2iqa} q - q^2 + q^2 e^{2iqa}} \\ T &= \frac{-4kq e^{-ia(k-q)}}{-k^2 - 2kq + k^2 e^{2iqa} - 2k e^{2iqa} q - q^2 + q^2 e^{2iqa}} \\ A &= \frac{-2k(k+q)}{-k^2 - 2kq + k^2 e^{2iqa} - 2k e^{2iqa} q - q^2 + q^2 e^{2iqa}} \\ B &= \frac{2k e^{2iqa}(k-q)}{-k^2 - 2kq + k^2 e^{2iqa} - 2k e^{2iqa} q - q^2 + q^2 e^{2iqa}} \end{aligned} \quad (11)$$

1.2. Untersuchung der Koeffizienten R und T. Um uns einen kleinen Überblick über die errechnete Lösung des Gleichungssystems zu verschaffen, betrachten wir die Situation in zwei unterschiedlichen Grenzfällen.

Untersuchung für sehr große Energien:

Wir betrachten in dieser ersten Betrachtung den Fall sehr großer Energien $E \gg V_0$, in diesem Falle ist praktisch:

$$q \sim k \quad (12)$$

da wir den Einfluss des Potentials vernachlässigen können. Wir berechnen mit Maple für diesen Fall die Absolutwerte von T und R, da ihre Quadrate den Anteil an transmittierter bzw. reflektierter Wahrscheinlichkeitsdichte angeben. Wir erwarten für diesen Fall, dass die Reflexion sehr klein wird und damit die Transmission sehr groß, also nahe Eins, wird.

Mit Maple errechnet man²:

$$|T| = 2\sqrt{2} \sqrt{\frac{k^2 q^2}{-6k^2 q^2 + k^4 \cos(2qa) + q^4 \cos(2qa) - k^4 - q^4 - 2k^2 q^2 \cos(2qa)}} \quad (13)$$

wir setzen in diesen Ausdruck $q = k$ ein und erhalten dann das Ergebnis:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |T| = 1 \quad (14)$$

das unseren Erwartungen entspricht. Genauso gehen wir für die Berechnung von $|R|$ vor. Mit Maple errechnet man:

$$|R| = \sqrt{\frac{(-1 + \cos(2qa))(k^2 - q^2)^2}{-6k^2 q^2 + k^4 \cos(2qa) + q^4 \cos(2qa) - k^4 - q^4 - 2k^2 q^2 \cos(2qa)}} \quad (15)$$

Wir setzen wiederum $q = k$ ein und erhalten:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |R| = 0 \quad (16)$$

Im Fall sehr großer Energien wird also der Anteil reflektierter Teilchen sehr klein und der Anteil der transmittierten Teilchen groß, genauso wie wir es erwarteten.

Untersuchung für sehr kleine Energien E:

In diesem anderen Grenzfall kann man $k = 0$ setzen und für q erhält man dann:

$$q = \sqrt{\frac{-2mV_0}{\hbar^2}} \quad (17)$$

Die Wurzel bleibt reell, da $V_0 < 0$ ist. Wir setzen nun $k = 0$ in die beiden oben berechneten Werte für $|T|$ und $|R|$ ein und erhalten:

$$\lim_{k \rightarrow 0} |R| = 1 \quad (18)$$

²Die folgende Ergebnisse stammen alle aus dem Programm "QMVorl8Pr1.mws".

sowie:

$$\lim_{k \rightarrow 0} |T| = 0 \quad (19)$$

Un damit also ein Ergebnis, dass mit unseren Erwartungen übereinstimmt. Die Teilchen werden mit großer Wahrscheinlichkeit reflektiert und keines wird transmittiert.

1.3. Der RAMSAUER-Effekt. 1921 beschloss RAMSAUER Edelgase mit langsamen Elektronen³. In diesem Prozess kann man die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Edelgasatomen als ein Wechselwirkungspotenzial mit begrenzter Reichweite auffassen. Damit ist es möglich, das mathematische Modell eines Potenzialtopfes mit endlicher Tiefe und endlicher Ausdehnung zur Beschreibung verwenden. Natürlich ist dieser Potenzialtopf nun dreidimensional, aber den nun zu besprechenden RAMSAUER-Effekt kann man auch mit dem Modell des eindimensionalen Potenzialtopfs verstehen.

Dazu müssen wir zuerst den Begriff des *Wirkungsquerschnitts* einführen.

Der Wirkungsquerschnitt. Ganz allgemein gesprochen ist der Wirkungsquerschnitt ein Maß für die Stärke einer Wechselwirkung von Teilchen der Sorte A mit Teilchen der Sorte B. Je nach Art der Wechselwirkung wird zwischen Reaktions-, Absorptions-, Streuwirkungsquerschnitt usw. unterschieden. Wenn nur die Reaktion als solche betrachtet wird, stellt der Wirkungsquerschnitt einen totalen Wirkungsquerschnitt dar, der die Häufigkeit aller Reaktionen einer Art angibt. Um eine solche Wechselwirkung zu beschreiben, geht man von der Vorstellung aus, dass man jedem Streuzentrum - hier ein Edelgasatom - eine Fläche σ zuordnen kann. Immer wenn der Schwerpunkt des einlaufenden Teilchens - hier ein Elektron -, das man als klein gegenüber σ annimmt, in diese Fläche trifft, soll sich eine „Reaktion“ ereignen. Die Fläche σ bezeichnet man als Wirkungsquerschnitt der Wechselwirkung.

Experimentelle Ergebnisse RAMSAUERs und ihre quantenmechanische Erklärung. RAMSAUER entdeckte nun bei der Streuung langsamer Elektronen an Edelgasatomen ein anomales Verhalten dieses Wirkungsquerschnitts. Mit sinkender Elektronengeschwindigkeit steigt der Wirkungsquerschnitt in erwarteter, d.h. klassisch zu verstehender Weise an. Denn wenn die Elektronen zu schnell sind, fliegen sie ganz einfach an den Edelgasatomen vorbei. Bewegen sich die Elektronen dagegen langsamer, so kommt es zu vermehrt auftretenden Streuungen. Mit weiter sinkender Elektronengeschwindigkeit steigt der Wirkungsquerschnitt weiter an, bis zu einem Maximum. Danach fällt er aber bei weiterer Geschwindigkeitsreduktion der Elektronen in klassisch unerklärlicher Weise ab. Danach steigt er bei weiterer Geschwindigkeitsreduktion wieder an, ein neues Maximum erreichend, um anschließend wieder abzufallen. Dieses seltsame Verhalten der Wechselwirkung ist mit klassischen Vorstellungen über Elektronen nicht zu erklären. Es lässt sich erklären, wenn man die Streuung von Elektronen an Edelgasatomen quantenmechanisch

³Die Elektronen wiesen Energien in der Größenordnung von 0.7 eV auf, $1\text{eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

im Bild unseres endlich tiefen Potenzialtopfs - die Elektronen also über ihre Wellenfunktion - beschreibt. Dann kann man das Minimum des Wirkungsquerschnitts so interpretieren, dass die Edelgasatome quasi durchsichtig werden für die Elektronen, es also zu keiner Streuung kommt. Durchsichtig bedeutet dann für die Wellenfunktion, dass die gesamte Wahrscheinlichkeitsdichte transmittiert, mit anderen Worten $|R| = 0$ wird. Wir suchen nun in unserer Lösung nach den Energiewerten, die ein Verschwinden des Reflexionskoeffizienten führen. Betrachten wir noch einmal das von Maple berechnete Ergebnis⁴:

$$|R| = \sqrt{\frac{(-1 + \cos(2qa))(k^2 - q^2)^2}{-6k^2q^2 + k^4 \cos(2qa) + q^4 \cos(2qa) - k^4 - q^4 - 2k^2q^2 \cos(2qa)}} \quad (20)$$

Setzt man diesen Ausdruck gleich Null, so erkennen man, dass dieses in zwei Fällen möglich ist:

$$k = q \implies \text{Unphysikalische Lösung} \quad (21)$$

Der erste Fall ist physikalisch unbrauchbar, da dieses Ergebnis nur für $V_0 = 0$ denkbar ist. Zu beachten ist auch, dass der Nenner für diesen Fall natürlich ungleich Null wird. Im zweiten Fall erhält man:

$$\cos(2 \cdot q \cdot a) = 1 \implies 2qa = n \cdot \pi, n = 0, 2, 4, 6, 8, \dots \quad (22)$$

Auch in diesem Fall wird der Nenner im Radikand nicht Null, so dass wir weiter rechnen können:

$$qa = n \cdot \pi, n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (23)$$

Über

$$E_n = V_0 + \frac{q_n^2 \cdot \hbar^2}{2m} = V_0 + \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{2 \cdot m \cdot a^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

erhalten wir diskrete Energiewerte - der Fall $n = 0$ ist physikalisch ohne Bedeutung! Zu beachten ist natürlich, dass in Abhängigkeit von V_0 immer gelten muss:

$$E_n > 0 \quad (25)$$

mit anderen Worten also die n so gewählt werden müssen, dass obige Bedingung erfüllt ist.

Das von RAMSAUER beobachtete -klassisch nicht verständliche Ergebnis- wird im Rahmen der quantenmechanischen Beschreibung des Elektrons durch die Wellenfunktion verständlich und ist eine weitere Bestätigung der Quantentheorie.

⁴Siehe Programm QMV8Pr1.mws.

1.4. Fall $E < 0$ und $V < 0$. Siehe Programm: QMV8Pr2.mws

In diesem zweiten Fall wollen wir nun die Situation sogenannter *gebundener Lösungen* betrachten⁵. Man kann aus Symmetriegründen das Potenzial auch in der folgenden Weise betrachten:

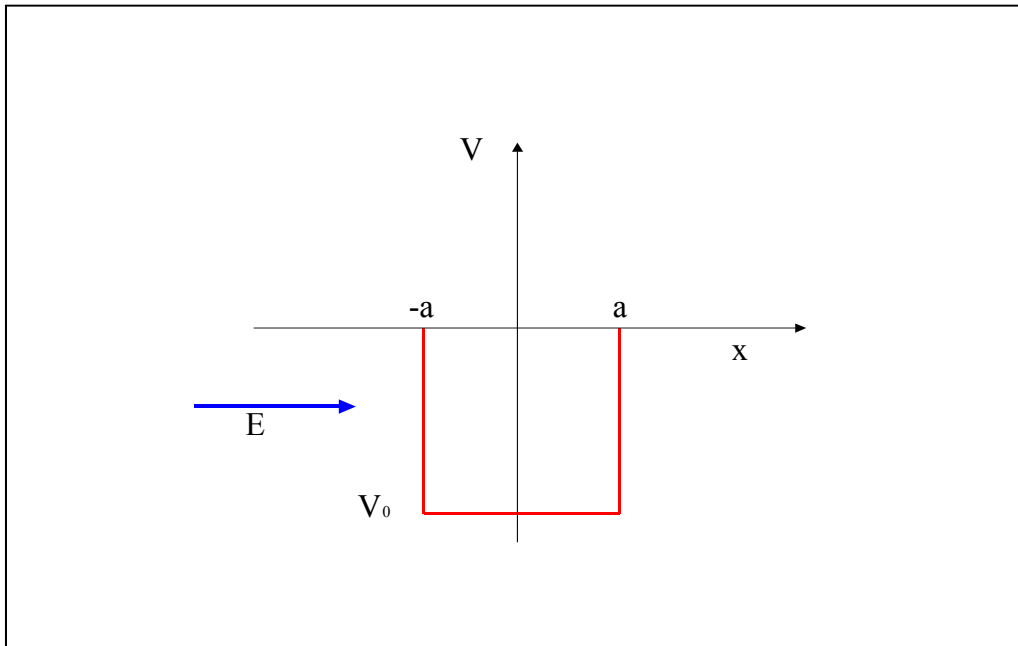


Figure 2: Energiediagramm zur Situation gebundener Lösungen

Wir berechnen die Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung wie gewohnt in den drei Bereichen, wie schon im ersten Fall.

Lösung im Bereich $x < -a$:

In diesem Bereich verschwindet das Potenzial und man erhält die Gleichung :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E \cdot \varphi(x) \Leftrightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) - \left(-E \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \right) \cdot \varphi(x) = 0 \quad (26)$$

Beachtet man, dass $E < 0$ gelten soll, so kann man folgendermaßen substituieren:

$$\kappa^2 := -E \cdot \frac{2m}{\hbar^2} > 0 \quad (27)$$

Damit lässt sich die SCHRÖDINGER-Gleichung kompakter schreiben als:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) - \kappa^2 \cdot \varphi(x) = 0 \quad (28)$$

⁵Für $E < 0$ werden wir Lösungen erhalten, die sich signifikant von den Streulösungen aus dem ersten Fall unterscheiden, man bezeichnet sie in der Quantenmechanik als gebundene Lösungen.

Wir können diese Gleichung mit Maple berechnen, kennen aber bereits die Lösung:

$$\varphi_1(x) = C_1 e^{\kappa x} + C_2 e^{-\kappa x} \quad (29)$$

Da wir aber beachten müssen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte endlich bleiben muss und wir den Bereich $x < -a$ betrachten, muss die zweite Konstante C_2 verschwinden. Wir erhalten somit für die stationäre Wellenfunktion in diesem Bereich:

$$\varphi_1(x) = C \cdot e^{\kappa x} \quad (30)$$

Lösung im Bereich $|x| < a$:

In diesem Bereich hat das Potenzial V den konstanten Wert V_0 . Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung hat somit die Gestalt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + (V_0 - E) \cdot \varphi(x) = 0 \quad (31)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot \varphi(x) = 0 \quad (32)$$

Unter der zusätzlichen Voraussetzung:

$$E - V_0 > 0 \quad (33)$$

kann man folgendermaßen substituieren:

$$q^2 := \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (34)$$

und erhält:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + q^2 \cdot \varphi(x) = 0 \quad (35)$$

Mit Maple wird im zugehörigen Programm die folgende Lösung bestimmt :

$$\varphi_2(x) = A \cdot \sin(qx) + B \cdot \cos(qx) \quad (36)$$

und es gibt keinen physikalischen Grund diese Lösung in irgendeiner Weise einzuschränken.

Lösung im Bereich $x > a$:

In diesem Bereich haben wir wieder die gleiche Situation wie im ersten Bereich, wir können also sofort die Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung angeben:

$$\varphi_3(x) = C_1 e^{\kappa x} + C_2 e^{-\kappa x} \quad (37)$$

Hierbei müssen wir hier aus physikalischen Gründen $C_1 = 0$ fordern, damit die Wahrscheinlichkeitsdichte endlich bleibt. Wir erhalten somit in diesem Bereich die Lösung:

$$\varphi_3(x) = F \cdot e^{-\kappa x} \quad (38)$$

Auswertung der Randbedingungen:

Völlig analog zum ersten Fall erhalten wir hier die folgenden Randbedingungen:

$$\begin{aligned}\varphi_1(-a) &= \varphi_2(-a) \\ \frac{\partial}{\partial x}\varphi_1(-a) &= \frac{\partial}{\partial x}\varphi_2(-a) \\ \varphi_2(a) &= \varphi_3(a) \\ \frac{\partial}{\partial x}\varphi_2(a) &= \frac{\partial}{\partial x}\varphi_3(a)\end{aligned}\tag{39}$$

die mit Maple ausgewertet, das folgende Gleichungssystem ergeben :

$$\begin{aligned}C \cdot e^{-\kappa x} + A \cdot \sin(qa) - B \cdot \cos(qa) &= 0 \\ C \cdot \kappa \cdot e^{-\kappa x} - A \cdot q \cdot \cos(qa) - B \cdot q \cdot \sin(qa) &= 0 \\ A \cdot \sin(qa) + B \cdot \cos(qa) - F \cdot e^{-\kappa x} &= 0 \\ A \cdot q \cdot \cos(qa) - B \cdot q \cdot \sin(qa) + F \cdot \kappa \cdot e^{-\kappa x} &= 0\end{aligned}\tag{40}$$

Maple gibt als Lösung dieses Gleichungssystems die triviale Lösung dieses homogenen Gleichungssystems an:

$$A = B = C = F = 0\tag{41}$$

Eine Lösung, die physikalisch gesehen keinen Sinn macht. Wir können nun aber einen Trick anwenden, der aus der Linearen Algebra stammt⁶. Wir betrachten die Koeffizientenmatrix des Systems:

$$M = \begin{pmatrix} \sin(qa) & -\cos(qa) & e^{-\kappa a} & 0 \\ -q \cdot \cos(qa) & -q \cdot \sin(qa) & \kappa \cdot e^{-\kappa a} & 0 \\ \sin(qa) & \cos(qa) & 0 & -e^{-\kappa a} \\ q \cdot \cos(qa) & -q \cdot \sin(qa) & 0 & \kappa \cdot e^{-\kappa a} \end{pmatrix}\tag{42}$$

und berechnen mit Maple ihre Determinante. Wir erhalten:

$$\begin{aligned}D &= -2 \cdot \cos(qa) \cdot \sin(qa) \kappa^2 \cdot e^{-2\kappa a} + 2q\kappa \cdot \sin^2(qa) \cdot e^{-2\kappa a} \\ &\quad - 2q\kappa \cdot \cos^2(qa) e^{-2\kappa a} + 2 \cdot \cos(qa) \cdot \sin(qa) q^2 \cdot e^{-2\kappa a}\end{aligned}\tag{43}$$

Wenn wir nun fordern, dass $D = 0$ gelten soll, dann bedeutet dies, dass das obige homogene System keine eindeutige Lösung mehr besitzt, sondern einer der Koeffizienten A, B, C, F frei gewählt werden kann und die anderen dann direkt von dieser Wahl abhängen. Dies ist ein Ergebnis der Theorie linearer Gleichungssysteme, das in der Linearen Algebra erklärt wird. Determinanten - zumindest 2×2 - Determinanten - sind aus der Schule bekannt, wie obige Determinante berechnet wird - es geschieht über den sogenannten LAPLACE-Entwicklungssatz - ist nicht weiter von Bedeutung, da der Computer dies übernimmt.

Wir setzen nun $D = 0$ und Maple löst diese Gleichung im Programm nach κ auf, da q eine Funktion von κ ist⁷:

$$q = \sqrt{-\kappa^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}\tag{44}$$

⁶Z.B. in Fischer, G.: Lineare Algebra, Vieweg 1991.

⁷Der folgende Ausdruck wird in (44) eingesetzt und dann die Gleichung $D = 0$ nach κ aufgelöst.

Man kann das Ergebnis der Auflösung von $D = 0$ nach κ als implizite Gleichung für κ auffassen, die dann noch einmal nach κ (zumindest numerisch) aufzulösen ist.

Maple liefert zwei Lösungen der Gleichung $D = 0$:

$$\kappa_1 = -\frac{q}{\tan(qa)} \quad (45)$$

$$\kappa_2 = q \cdot \tan(qa) \quad (46)$$

Beide Gleichungen können im konkreten Fall, d.h. bei bekanntem Potenzial numerisch näherungsweise gelöst werden. Man kann allerdings auch an den beiden obigen Gleichungen etwas ablesen, denn setzt man:

$$x := qa \quad (47)$$

so folgt:

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \left(\frac{x}{a}\right)^2} = \frac{\sqrt{-\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 - x^2}}{a} \quad (48)$$

Definiert man nun noch:

$$l := -\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 > 0 \quad (49)$$

so bleibt:

$$\kappa = \frac{\sqrt{l - x^2}}{a} \quad (50)$$

Diesen Ausdruck setzt man in beiden Gleichungen auf der linken Seite ein. Auf der rechten Seite setzt man $x = qa$ ein und erhält:

$$\frac{\sqrt{l - x^2}}{a} = -\frac{x}{a \cdot \tan(x)} \Leftrightarrow \sqrt{l - x^2} = -\frac{x}{\tan(x)} \quad (51)$$

$$\frac{\sqrt{l - x^2}}{a} = \frac{x}{a} \tan(x) \Leftrightarrow \sqrt{l - x^2} = x \tan(x) \quad (52)$$

Die beiden Gleichungen lassen sich geschlossen nicht mehr lösen! Eine Möglichkeit ist, mit Maple bei bekannten Konstanten numerische Näherungslösungen zu bilden⁸. Man kann aber schon über eine graphische Darstellung der beiden Gleichungen ein interessantes Ergebnis gewinnen. Dazu fasst man beide Seiten der Gleichungen als Funktionen in x auf, zeichnet mit Maple beide Graphen und interpretiert ihre Schnittpunkte als Lösungen der Gleichung. Also für die erste Gleichung:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sqrt{l - x^2} \\ g(x) &= -\frac{x}{\tan(x)} \end{aligned}$$

⁸Dies geschieht im nächsten Kapitel.

Lässt man Maple beide Funktionen in ein gemeinsames Diagramm zeichnen, so erhält man die folgende Darstellung:

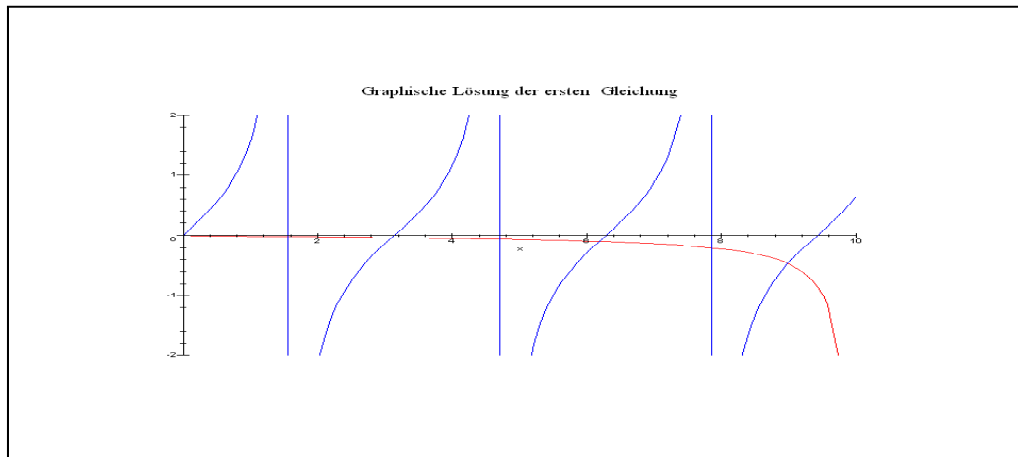


Figure 3: Graphische Lösung der ersten Gleichung: dabei ist die Funktion $f(x)$ in roter Farbe gezeichnet.

Im Zweiten Fall erhält man das folgende Diagramm:

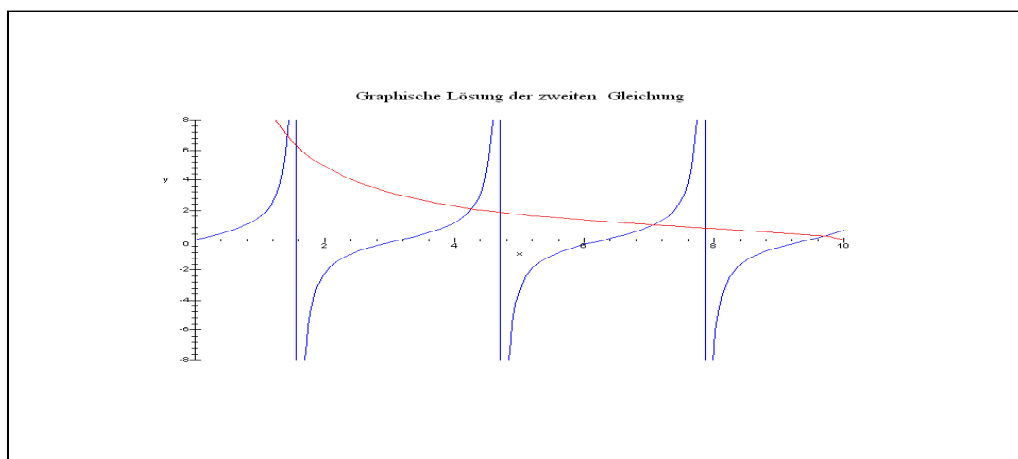


Figure 4: Graphische Lösung im zweiten Fall, in roter Farbe ist wieder $f(x)$ eingezeichnet.

Man kann man in beiden Fällen erkennen, dass immer diskrete Schnittpunkte auftreten. Physikalisch bedeutet dies, dass κ nur diskrete Werte annimmt und somit die Energie E , die ein Teilchen innerhalb des Potenzialtopfs annehmen kann ebenfalls nur diskrete

Werte durchläuft!

Wenn man im Programm in den Graphen die Schnittpunkte anklickt, so interessieren nur die x-Werte, man erhält näherungsweise⁹:

$$x_n \sim \frac{\pi}{2}n, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (53)$$

Mit anderen Worten, da $x = qa$, erhält man:

$$q_n \sim \frac{n\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (54)$$

Hieraus erhält man schließlich dann die folgenden Energiewerte:

$$q_n^2 \sim \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (55)$$

$$E_n \sim V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m(2a)^2} < 0, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (56)$$

Die Abbruchbedingung für n wird also durch das Potenzial V_0 vorgegeben. Sobald die Eigenwerte nicht mehr kleiner als Null sind, muss man die Diskretisierung abbrechen.

Bemerkung:

Die Berechnung der Koeffizienten A, B, C, F, wobei einer beliebig wählbar sein ist, ist nur im konkreten Fall eines bekannten Potenzials und einer bekannten Potenzialbreite a numerisch näherungsweise möglich und kann daher nicht allgemein durchgeführt werden.

Im folgenden soll aber nun ein konkretes numerisches Beispiel durchgerechnet werden, man findet es im Programm "QMV8Pr3.mws".

⁹Die Näherung wird umso besser, je tiefer und breiter der Potenzialtopf ist

2. NUMERISCHES BEISPIEL: $E < 0$ UND $V_0 < 0$

In diesem Beispiel werden die folgenden Werte gewählt:

$$\begin{aligned} V_0 &= -100 \text{ Nm} \\ a &= 10 \text{ m} \end{aligned} \quad (57)$$

da wir die Konstanten m und \hbar gleich Eins setzen erhalten wir zwar ein physikalisch unrealistisches Ergebnis¹⁰, dafür erhalten wir eine nicht zu große Zahl von diskreten Energiewerten. Die Effekte sind aber dennoch der Theorie entsprechend.

2.1. Numerische Auswertung der ersten Lösung:. Die erste Lösung, die sich aus dem Nullsetzen der Determinante ergibt lautet:

$$\kappa = -\frac{q}{\tan(qa)} \quad (58)$$

Substituiert man: $x := qa$ und beachtet man:

$$\kappa^2 = -2V_0 - q^2 = -2V_0 - \frac{x^2}{a^2} \quad (59)$$

so lautet die obige Gleichung umgestellt:

$$\tan(x) = -\frac{x}{\sqrt{2V_0a^2 - x^2}} = -\frac{x}{\sqrt{20000 - x^2}} \quad (60)$$

Diese Gleichung wird von Maple im Programm numerisch in den einzelnen Intervallen gelöst, da nur positive Werte für κ erlaubt sind, werden auch nur positive x_i als Lösung berücksichtigt.

Aus diesen Lösungen x_i erhält man die Werte der Energie E_i sowie die Werte für κ_i über:

$$\begin{aligned} \kappa_i &= -\frac{x_i}{a \cdot \tan(x_i)} = -\frac{x_i}{10 \cdot \tan(x_i)} \\ E_i &= V_0 + \frac{q_i^2}{2} = -100 + \frac{x_i^2}{200} \end{aligned} \quad (61)$$

2.2. Auswertung des Gleichungssystems für die erste Lösung:. Setzt man die obige Beziehung für κ in das Gleichungssystem (41) ein, so erhält man :

$$\begin{aligned} A_i \cdot \sin(x_i) - B_i \cdot \cos(x_i) + C_i \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} &= 0 \\ -A_i \frac{x_i}{a} \cdot \cos(x_i) - B_i \frac{x_i}{a} \cdot \sin(x_i) + C_i \cdot \left(-\frac{x_i}{a \cdot \tan(x_i)}\right) \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} &= 0 \\ A_i \cdot \sin(x_i) + B_i \cdot \cos(x_i) - F_i \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} &= 0 \\ A_i \frac{x_i}{a} \cdot \cos(x_i) - B_i \frac{x_i}{a} \cdot \sin(x_i) + F_i \cdot \left(-\frac{x_i}{a \cdot \tan(x_i)}\right) \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} &= 0 \end{aligned} \quad (62)$$

¹⁰Die gewählten Werte haben natürlich ebenfalls keine realistische Größe, Maple hat aber mit der Darstellung und Berechnung keine Schwierigkeiten und das Ergebnis wird nicht verfälscht!

Dieses Gleichungssystem hat nun eine Koeffizientendeterminante, die für jeden Wert von x_i und $a = 10\text{m}$ Null ist. Man kann dieses überbestimmte System nun lösen, indem man eine Variable frei lässt und die anderen in Abhängigkeit von dieser Variable bestimmt. Betrachten wir aber noch einmal das Gleichungssystem (41): nur wenn man dort $B = 0$ und $F = -C$ wählt, erhält man die erste Beziehung für κ , da wir dann nur noch zwei linear unabhängige Gleichungen besitzen:

$$\begin{aligned}\sin(qa) \cdot A + e^{-\kappa a} \cdot C &= 0 \\ -q \cos(qa) \cdot A + \kappa \cdot e^{-\kappa a} \cdot C &= 0\end{aligned}\quad (63)$$

Die Determinante dieses Systems ist:

$$D := \begin{vmatrix} \sin(qa) & e^{-\kappa a} \\ -q \cos(qa) & \kappa \cdot e^{-\kappa a} \end{vmatrix} = \sin(qa) \cdot \kappa \cdot e^{-\kappa a} + q \cos(qa) \cdot e^{-\kappa a} \quad (64)$$

Aus der Gleichung $D = 0$ folgt:

$$\kappa = -\frac{q}{\tan(qa)} \quad (65)$$

wie vorausgesetzt.

Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned}A_i &= -C_i \cdot \frac{1}{\sin(x_i)} \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} \\ B_i &= 0 \\ F_i &= -C_i\end{aligned}\quad (66)$$

Wir erhalten damit als vorläufige Lösung:

$$\psi_i(x) = \begin{cases} C_i \cdot e^{\kappa_i x}, & x < -a \\ -C_i \cdot \frac{1}{\sin(x_i)} \cdot e^{\left(\frac{x_i}{\tan(x_i)}\right)} \cdot \sin\left(\frac{x_i}{a}x\right), & -a < x < a \\ -C_i \cdot e^{-\kappa_i x}, & x > a \end{cases} \quad (67)$$

Zu beachten ist, dass hier eine antisymmetrische Lösung vorliegt, d.h. es gilt:

$$\varphi_i(-x) = -\varphi_i(x) \quad (68)$$

Den Koeffizienten C_i berechnen wir aus der Normierungsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_i(x)|^2 dx = 1 \quad (69)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_i(x)|^2 dx = C_i^2 \left(\int_{-\infty}^{-a} e^{2\kappa_i x} dx + \frac{e^{\frac{2x_i}{\tan(x_i)}} \int_{-a}^a \sin^2(x) dx}{\sin^2(x_i)} + \int_a^{\infty} e^{-2\kappa_i x} dx \right) = 1 \quad (70)$$

und damit:

$$C_i = \frac{1}{\sqrt{\left(\int_{-\infty}^a e^{2\kappa_i x} dx + \frac{e^{-a}}{\sin(x_i)^2} + \int_a^{\infty} e^{-2\kappa_i x} dx \right)}} \quad (71)$$

Alle diese Werte werden im Programm für jeden Wert x_i und $a = 10m$ berechnet.

2.3. Numerische Auswertung der zweiten Lösung:. Die zweite Lösung, die sich aus dem Nullsetzen der Determinante ergibt lautete:

$$\kappa = q \cdot \tan(qa) \quad (72)$$

Substituiert man $x := qa$ und beachtet man:

$$\kappa^2 = -2V_0 - q^2 = -2V_0 - \frac{x^2}{a^2} \quad (73)$$

so lautet die obige Gleichung umgestellt:

$$\tan(x) = \frac{\sqrt{2V_0 a^2 - x^2}}{x} = \frac{\sqrt{20000 - x^2}}{x} \quad (74)$$

Diese Gleichung wird von Maple im Programm numerisch in den einzelnen Intervallen gelöst, da nur positive Werte für κ erlaubt sind, werden auch nur positive x_i als Lösung berücksichtigt.

Aus diesen Lösungen x_i erhält man die Werte der Energie E_i sowie die Werte für κ_i über:

$$\begin{aligned} \kappa_i &= \frac{x_i}{a} \cdot \tan(x_i) = \frac{x_i}{10} \cdot \tan(x_i) \\ E_i &= V_0 + \frac{q_i^2}{2} = -100 + \frac{x_i^2}{200} \end{aligned} \quad (75)$$

2.4. Auswertung des Gleichungssystems für die zweite Lösung:. Man erhält in diesem Fall das folgende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} A_i \sin(x_i) - B \cos(x_i) + C_i \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} &= 0 \\ -A_i \frac{x_i}{a} \cos(x_i) - B_i \frac{x_i}{a} \sin(x_i) + C_i \frac{x_i}{a} \tan(x_i) \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} &= 0 \\ A_i \sin(x_i) + B \cos(x_i) - F_i \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} &= 0 \\ A_i \frac{x_i}{a} \cos(x_i) - B_i \frac{x_i}{a} \sin(x_i) + F_i \frac{x_i}{a} \tan(x_i) \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} &= 0 \end{aligned} \quad (76)$$

In diesem Falle müssen wir $A = 0$ wählen, um die zweite Lösung aus der Determinantenbedingung zu erhalten. Dies geschieht durch die Wahl von $F = C$. Dann reduziert sich nämlich das obige Gleichungssystem auf ein System mit zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned} -B \cos(qa) + C \cdot e^{-\kappa a} &= 0 \\ -Bq \sin(qa) + \kappa C e^{-\kappa a} &= 0 \end{aligned} \quad (77)$$

mit der Determinante:

$$D = \begin{vmatrix} -\cos(qa) & e^{-\kappa a} \\ -q \sin(qa) & \kappa \cdot e^{-\kappa a} \end{vmatrix} = -\cos(qa) \cdot \kappa \cdot e^{-\kappa a} + q \sin(qa) \cdot e^{-\kappa a} \quad (78)$$

Aus der Forderung $D = 0$ folgt dann sofort:

$$\kappa = q \cdot \tan(qa) \quad (79)$$

wie gefordert. Man erhält dann die folgenden Ergebnisse für die Koeffizienten:

$$\begin{aligned} A_i &= 0 \\ B_i &= C_i \cdot \frac{1}{\cos(x_i)} \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} \\ F_i &= C_i \end{aligned} \quad (80)$$

In diesem Fall lautet die vorläufige Lösung:

$$\psi_i(x) = \begin{cases} C_i \cdot e^{\kappa_i x}, x < -a \\ C_i \cdot \frac{1}{\cos(x_i)} \cdot e^{-x_i \tan(x_i)} \cdot \cos\left(\frac{x_i}{a} x\right), -a < x < a \\ C_i \cdot e^{-\kappa_i x}, x > a \end{cases} \quad (81)$$

Zu beachten ist, dass wir nun symmetrische Lösungen gefunden haben, d.h. es gilt:

$$\varphi_i(-x) = \varphi_i(x) \quad (82)$$

Den Koeffizienten C_i bestimmen wir dann wiederum aus der Normierungsbedingung, wie im ersten Fall.

2.5. Darstellung der Energieniveaus im Potenzialtopf. Mit Maple werden in beiden Fällen die Energien berechnet und anschließend erhalten wir die folgende Graphik:

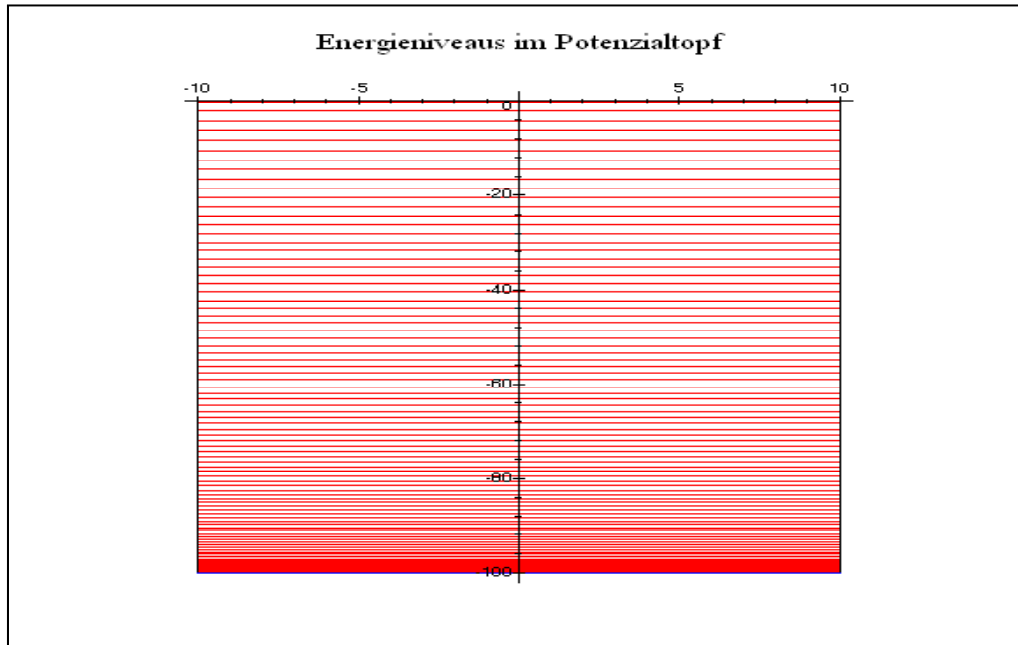


Figure 5: Energieniveaus im Potenzialtopf für das gewählte Beispiel.

Man kann die diskreten Energieniveaus erkennen, ganz unten liegen die Energien sehr dicht beieinander, man wird für Festkörper in solchen Fällen von "Energiebändern" sprechen!

2.6. Bewegung eines Wellenpakets im Potenzialtopf. Es gilt wie je bereits bekannt¹¹ für die allgemeine Lösung der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung im Falle diskreter Energien die Formel:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)} \quad (83)$$

wobei wir die Koeffizienten a_n aus der Anfangsbedingung berechnen:

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \varphi(x, 0) \cdot dx \quad (84)$$

In diesem numerischen Beispiel wurde die folgende Anfangsbedingung gewählt:

$$\psi(x, 0) := \psi_0(x) = A \cdot e^{-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right)} \quad (85)$$

¹¹Siehe Skript zur 19. Vorlesung *Einführung in die Quantenphysik*.

d.h. die Situation eines Elektrons in der Mitte des Potenzialtopfes - bestehend aus positiven Ladungen - dessen wahrscheinlichste Geschwindigkeit Null ist. Die Konstante A wird im Programm durch die Bedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \quad (86)$$

festgelegt. Da diese Ausgangswellenfunktion symmetrisch ist, kommen in der obigen allgemeinen Entwicklung auch nur die symmetrischen Lösungen vor. Wir erwarten, dass im Mittel das Elektron sich nicht bewegt, da die Anziehungskraft von beiden Seiten des Potenzialtopfes gleich stark ist, diese Erwartung wird in einer Animation auch bestätigt, siehe im dazugehörigen Programm "QMV8Pr3.mws". Die Symmetrie im Ergebnis ist aus der Symmetrie des Potenzialtopfes zu verstehen. Die Variable x muss als Abstand vom Ursprung interpretiert werden.