

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 4

JOCHEN GEPPERT

Wintersemester

ABSTRACT. Behandelt wird nun das quantenmechanische Modell der Potenzialstufe mit endlicher Höhe.

1. STREUUNG FREIER TEILCHEN AN EINER ENDLICHEN POTENZIALSTUFE

Maple-Dateien zur Vorlesung:

- QMV4Pr1.mws (Behandlung des Modells "endliche Potenzialstufe")
- QMV4Pr2.mws (Reflexion eines Teilchens)

Wir behandeln nun das quantenmechanische Modell der endlich hohen Potenzialstufe. Im Rahmen dieser Behandlung werden wir auf interessante mathematische Voraussetzungen treffen - etwa den Tunneleffekt - die wirklich den Erfahrungen der klassischen Physik des Alltages widersprechen. Sie werden aber genauso in der Natur beobachtet. Die Übereinstimmung der Ergebnisse der Anwendung der SCHRÖDINGER-Gleichung mit in der Natur vorkommenden Phänomenen ist die stärkste Stütze der Quantenmechanik.

Das Modell der Potenzialstufe mit endlich hohen Wänden ist das einfachste Modell für eine Reihe von in der Physik häufig vorkommenden Problemen, die man unter dem Begriff „**Streuung**“ zusammenfasst. Beispiele hierfür sind die Streuung von Ionen an Ionen - das wirkende Potenzial ist das Coulomb-Potenzial -, von Nukleonen am Atomkern - Coulomb- und Kernpotenzial -, von Elektronen an einer geladenen Metalloberfläche usw. Es lassen sich bereits aus diesem einfachsten Modell wichtige Schlüsse auf experimentell beobachtbare Ergebnisse ziehen.

Es soll der einfachste, d.h. "eindimensionale Fall" behandelt werden: $V(\mathbf{r}) = V(x)$. Natürlich ist ein physikalisches Problem immer ein räumliches, also ein dreidimensionales Problem, d.h. von x , y und z abhängig. Wir stellen uns jedoch vor, dass etwa eine geladene Metallplatte eine ebene Platte senkrecht zur x -Achse sei und eine sehr große Ausdehnung in y - und z -Richtung besitze. Sie sei größer als der Teilchenstrahldurchmesser, so dass die potenzielle Energie der auf sie zufliegenden Elektronen praktisch nur von x allein abhängt. Natürlich ist mit dieser Metallplatte kein natürlicher Potentialsprung völlig zu realisieren, aber wir berechnen ja auch nur ein erstes Modell.

Bemerkung:

1. Die potenzielle Energie ist auch in diesem Fall zeitunabhängig, d.h.

$$V(x, t) = V(\mathbf{x}) \quad (1)$$

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung wird daher wieder durch:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (2)$$

geliefert, bzw. durch Überlagerung dieser Funktionen, wobei $\psi(x)$ Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung:

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

ist.

2. Wir werden für dieses Modell für abstoßendes Potenzial Lösungen für alle Werte der Variablen E erhalten. Da

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

gilt, erhält man somit auch scharfe Werte für den Impuls. Dies widerspräche jedoch der Unschärferelation, da sonst der Teilchenort völlig unscharf wäre. D.h. also **man erhält die allgemeine Lösung des Problems "Potenzialstufe mit endlich hohen Wänden" nur durch Überlagerung von Lösungen (2), also durch ein Wellenpaket.**

Im Folgenden soll ein homogener Teilchenstrahl mit konstanter Teilchenzahldichte entlang der Strahlrichtung betrachtet werden. Diesen Strahl können wir dann durch eine nicht normierte DE BROGLIE-Welle beschreiben:

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad (4)$$

und mit

$$\psi \cdot \psi^* = |A|^2 \quad (5)$$

erhält man einen Ausdruck für die **Teilchenzahldichte im Volumenelement dV** ¹. Den Ausdruck $\psi \cdot \psi^*$ bezeichnet man als **Teilchenzahldichte**. Der Teilchenstrahl bewege sich in x-Richtung mit dem Impuls p und ist in x-,y-,z- Richtung unendlich ausgedehnt. Da wir zuerst nun statt eines Teilchens eine sehr große Anzahl von Teilchen beschreiben, ist der Ort irgend eines Teilchens natürlich in der gesamten, näherungsweise als groß zu betrachtenden Ausdehnung des Teilchenstrahls beliebig unbestimmt. Dann verbietet die Unschärferelation nicht mehr, den Impuls entsprechend relativ scharf zu bestimmen, d.h. die Lösung näherungsweise durch eine einzige DE BROGLIE-Welle zu wählen. Die Wellenfunktion ergibt also eine Aussage über den Teilchentransport. Über die Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\mathbf{j}(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(x, t) \cdot \frac{d}{dx} \psi(x, t) - \left(\frac{d}{dx} \psi^*(x, t) \right) \cdot \psi(x, t) \right] \quad (6)$$

lässt sich nämlich die elektrische Stromdichte des Elektronenstrahls beschreiben². Damit lassen sich die experimentell beobachtbaren Phänomene *Reflexion* und *Transmission* beschreiben.

Im Anschluss an diese Rechnung werden wir dann die Entwicklung eines Wellenpakets, sprich die Streuung eines einzelnen Teilchens³ betrachten.

¹ Sie entspricht in diesem Falle der Wahrscheinlichkeitsdichte des Elektronennachweises!

² Siehe *Quantenmechanik*, Vorlesung 2.

³ An dieser Stelle wird somit implizit die Kopenhagener Deutung (siehe Skript 28) der Quantenmechanik verwendet. In der Statistischen Interpretation wird dagegen angenommen, dass man ein einzelnes Teilchen nicht durch eine Wellenfunktion beschreiben kann, sondern nur eine Teilchengesamtheit, also eine große Zahl von Teilchen, siehe Skript 29.

2. DER EINFALLENDE TEILCHENSTRAHL HABE EINE ENERGIE $E > V_0$

Wir betrachten zuerst den folgenden Fall, dargestellt im Potenzialverlauf:

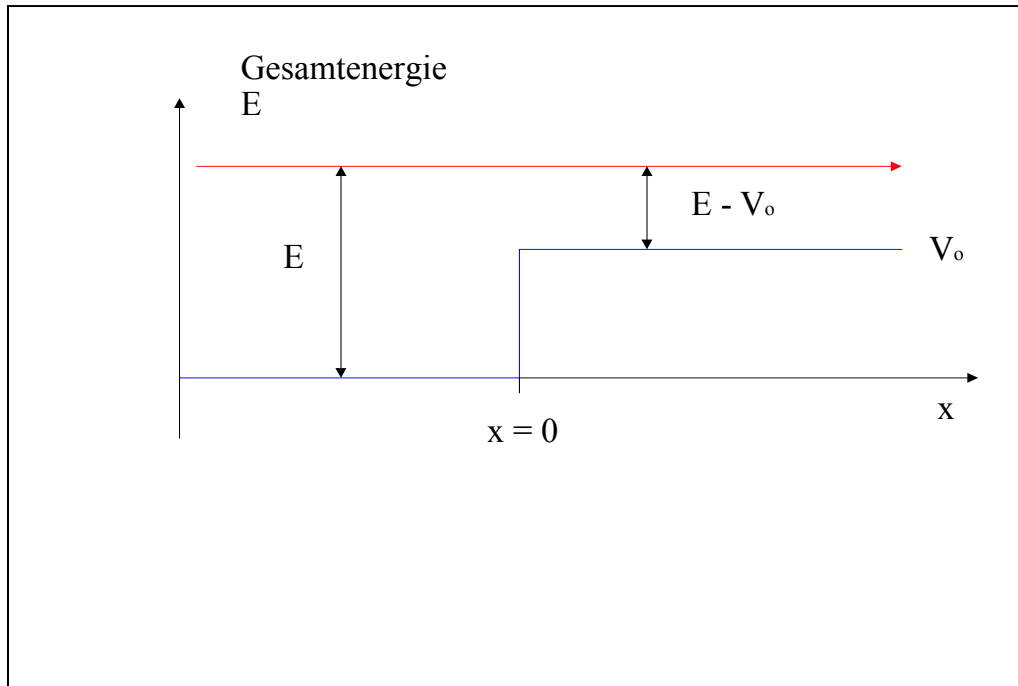


Figure 1: Einfallender Teilchenstrahl treffe mit einer Energie $E > V_0$ auf einen Potenzialwall.

Bereich $x < 0$. In diesem Bereich gilt für das Potenzial $V_0 = 0$ und die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung reduziert sich auf:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) - E \varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad (7)$$

über die Substitution $k^2 := \frac{2m}{\hbar^2} E$ wird im Programm "QMV4Pr1.mws" die Funktion:

$$\varphi(x) = e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \quad (8)$$

als Lösung errechnet. Der Koeffizient R erlaubt mathematisch eine mögliche Reflexion des Elektronenstrahls am Potenzial!⁴ Die allgemeine Lösung ergibt sich dann für diesen Bereich durch:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \left(e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \right) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (9)$$

⁴Die weitere Rechnung wird zeigen, ob dieser Koeffizient verschwindet - wie man es klassisch eigentlich in diesem Falle erwartet - oder nicht.

Maple zeigt, dass die Annahme $E > 0$ für diesen Bereich physikalisch sinnvoll ist, da wir für $E < 0$ eine Lösung erhalten, die für $x \rightarrow -\infty$ gegen Unendlich strebt, was physikalisch unsinnig ist.

Die Stromdichte in diesem Bereich ergibt sich als Überlagerung der einfallenden und der reflektierten Stromdichte⁵:

$$\mathbf{j} = j_0 \cdot \mathbf{e}_x - j_R \cdot \mathbf{e}_x = \frac{\hbar k}{m} \cdot \mathbf{e}_x - \frac{\hbar k}{m} |R|^2 \cdot \mathbf{e}_x \quad (10)$$

Bereich $x > 0$. Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung lautet in diesem Fall nun:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V_0 \varphi(x) - E \varphi(x) &= 0 \\ &\Leftrightarrow \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi(x) &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Mit der Substitution:

$$q^2 := \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (12)$$

erhält man:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + q^2 \varphi(x) = 0 \quad (13)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist, wie man mit Maple leicht überprüft:

$$\varphi(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx} \quad (14)$$

Physikalisch bedeutet dies, eine von links nach rechts einfallende "Welle" repräsentiert durch den Term $A e^{iqx}$ bzw. eine von rechts nach links laufende "Welle", repräsentiert durch den Term $B e^{-iqx}$. Man beachte, dass obwohl man $\varphi(x)$ nicht messen kann, der Realteil der Wellenfunktion physikalische Teilchen beschreibt, da aber von rechts nach links sich keine Teilchen bewegen, muss $B = 0$ gelten⁶. Die Konstante A ersetzen wir durch T, dies soll an Transmission erinnern, die Bedeutung wird im Folgenden verständlich.

Man erhält:

$$\varphi(x) = T e^{iqx} \quad (15)$$

Die allgemeine Lösung für den Bereich $x > 0$ lautet somit:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = T e^{iqx} \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (16)$$

und für die Stromdichte erhält man:

$$\mathbf{j}_T = j_T \cdot \mathbf{e}_x = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 \cdot \mathbf{e}_x = \frac{q}{k} j_0 |T|^2 \cdot \mathbf{e}_x \quad (17)$$

⁵Man beachte, dass natürlich die reflektierten Anteile sich in genau die entgegengesetzte Richtung wie die einfallenden Elektronen bewegen.

⁶Für ein derartiges Verhalten liegt keine Ursache vor.

Randbedingungen für den Übergang zwischen beiden Bereichen. Für die Wellenfunktion $\varphi(x)$ fordert man die beiden folgenden Randbedingungen für den Übergang zwischen beiden Potenzialbereichen:

$$\begin{aligned}\varphi_{x<0}(0) &= \varphi_{x>0}(0) \\ \frac{\partial}{\partial x}\varphi_{x<0}(0) &= \frac{\partial}{\partial x}\varphi_{x>0}(0)\end{aligned}\tag{18}$$

Die Begründung für diese Randbedingung folgt aus der SCHRÖDINGER-Gleichung in der Form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) - E\varphi(x) = -V\varphi(x)$$

Wir gestatten dem Potenzial einen Sprung an der Stelle $x = 0$, eben von Null auf V_0 , dies bedeutet, dass. auch die zweite Ortsableitung von $\varphi(x)$ kann eine sogenannte Singularität - also einen Sprung - besitzen kann. Diese Möglichkeit der Sprungstelle der zweiten Ableitung bedeutet, dass die erste Ableitung wie auch die Ausgangsfunktion zumindest an dieser Stelle stetig sein müssen. Besitzt z.B. die erste Ableitung an der Stelle $x = 0$ einen Sprung, so kann man über die zweite Ableitung keine Aussage mehr machen⁷. Mit anderen Worten, die obigen Randbedingungen sichern die Sprungmöglichkeit der zweiten Ableitung.

Eine Beispiel für eine Funktion mit zwei Singularitäten (Sprüngen) zeigt die folgende Abbildung:

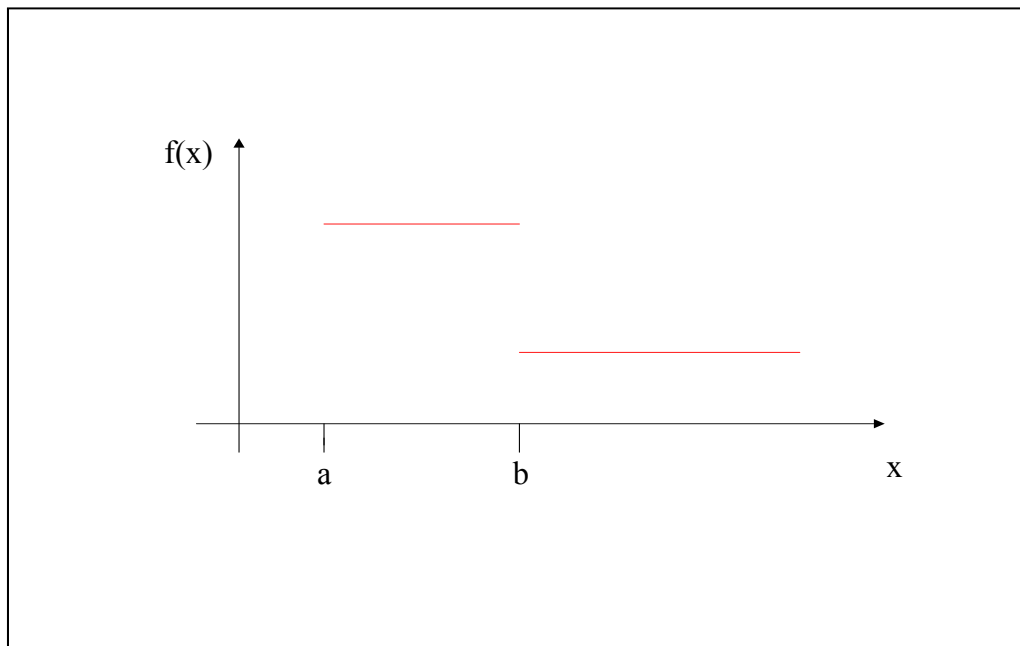


Figure 2: Beispiel für eine Funktion mit zwei Sprüngen.

Die Auswertung der Randbedingungen für die Lösungen wird im Programm

⁷Sie ist dann eine sogenannte δ -Funktion.

”QMV4Pr1.mws” durchgeführt und man erhält:

$$\begin{aligned} R &= \frac{k - q}{k + q} \\ T &= 2 \frac{k}{k + q} \end{aligned} \quad (19)$$

Im Programm ”QMV4Pr1.mws” wird nun der Realteil der Gesamtwellenfunktion sowie die Teilchenzahldichte für eine beliebige Energie E , sowie ein beliebiges Potenzial V_0 berechnet und graphisch dargestellt.

Man erhält z.B. für $k = 4 \frac{1}{m}$ ⁸ und $E = 8 \cdot V_0$ für $V_0 = 1$ Nm, die folgende Graphik der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

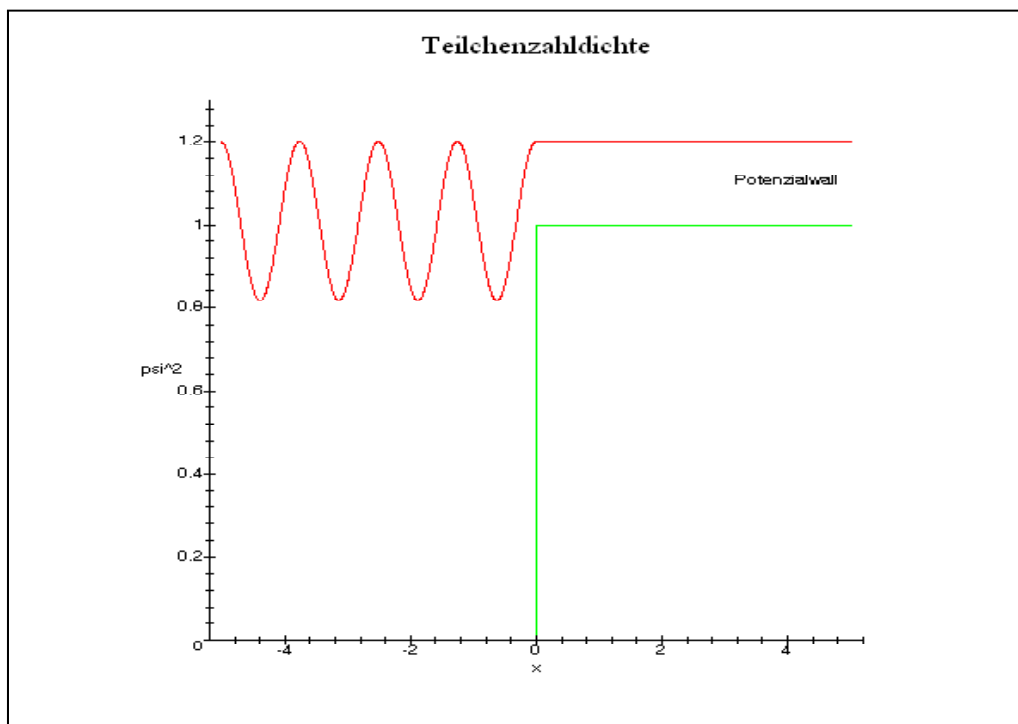


Figure 3: Nichtnormierte Teilchenzahldichte eines Teilchenstroms, der auf eine abstossende Potenzialwand zuläuft. Die Energie der Teilchen ist größer als Potenzial.

Man erwartet in dieser Situation, dass der Teilchenstrom das abstossende Potenzial überwindet, da $E > V_0$ vorausgesetzt wird. Das Bild zeigt auch im Bereich des Potenzials eine nichtverschwindende konstante Teilchenzahldichte an. Die oszillierende Teilchenzahldichte im Bereich $x < 0$ deutet auf einen reflektierten Anteil hin - überlagern sich einfallende und reflektierte Elektronen, so schwankt die Dichte, je nachdem an welcher Stelle im Elektronenstrom man misst⁹.

⁸Beachte, dass $m = \hbar = 1$ gesetzt wurde, es kommt nur auf den Effekt an.

⁹Man kann an dieser Stelle wiederum nur darauf aufmerksam machen, dass es die Natur ist, die dazu zwingt, Elektronen und andere Teilchen so zu beschreiben! Vorstellen kann man sich dieses

Betrachtung der Stromdichten. Hier sind zwei Betrachtungen interessant. Zum einen das Verhältnis von reflektierter zu einfallender Stromdichte:

$$\frac{j_R}{j_0} = |R|^2 = \left(\frac{k - q}{k + q} \right)^2 \quad (20)$$

und zum anderen das Verhältnis von transmittierter zu einfallender Stromdichte:

$$\frac{j_T}{j_0} = \frac{q}{k} |T|^2 = \frac{4qk}{(k + q)^2} \quad (21)$$

Die folgende Abbildung zeigt die beiden Verhältnisse:

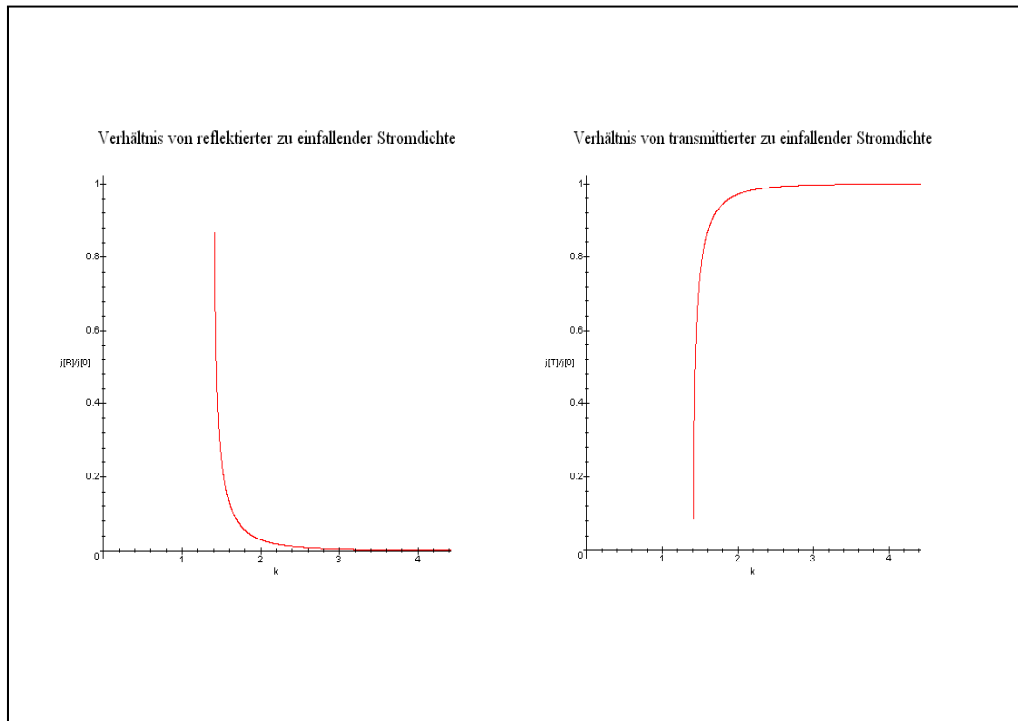


Figure 4: Darstellung der beiden Verhältnisse, die Einheit der horizontalen Achse ist $1/\text{m}$.

Man kann erkennen, dass der Teilchenstrom erhalten ist:

$$\frac{j_R}{j_0} + \frac{j_T}{j_0} = \frac{4qk + (k - q)^2}{(k + q)^2} = 1 \Rightarrow j_0 = j_R + j_T \quad (22)$$

Dies bestätigt unsere Voraussetzung, dass es im betrachteten Problem keinen Absorptionsmechanismus für die Elektronen gibt. Betrachtet man die linke Darstellung nicht, wenn man mit Elektronen kleine Billardkugeln verbindet!

im letzten Bild, so kann man erkennen, dass für Energien $E > V_0$ ein Teil der Welle reflektiert, ein anderer transmittiert wird. Dies ist ein charakteristisches quantenmechanisches Ergebnis, dass man klassisch betrachtet für einen Teilchenstrom nicht erwartet. Für den experimentellen Nachweis bedeutet dies, dass einige Teilchen des einfallenden Strahls -obwohl ihre Energie ausgereicht hätte, die Barriere zu überwinden - reflektiert werden. Wie in der letzten Abbildung zu sehen, steigt die Transmissionswahrscheinlichkeit kontinuierlich von 0 für $E = V_0$ auf 1 für $E \rightarrow \infty$ an; die Reflexionswahrscheinlichkeit nimmt entsprechend ab.

Vergleichen wir die Situation aber einmal mit dem klassischen Analogon einer Kugel¹⁰ der Masse m und der Geschwindigkeit v , die auf einen Berg der Höhe h reibungsfrei zuläuft. Wir setzen nun voraus, dass

$$E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 > E_{pot} = mgh \quad (23)$$

ist, d.h. die Kugel kann den Berg überrollen und rollt auf jeden Fall auf der anderen Bergseite weiter. Zu beachten ist in dieser Betrachtungsweise der klassischen Physik dabei nur, dass kinetische Energien immer positiv sind, d.h. es muss gelten:

$$\frac{1}{2}mv^2 > mgh \Rightarrow v > \sqrt{2gh} \quad (24)$$

damit die Kugel den Berg hinaufrollen kann.

In der folgenden Graphik ist diese Situation schematisch angedeutet:

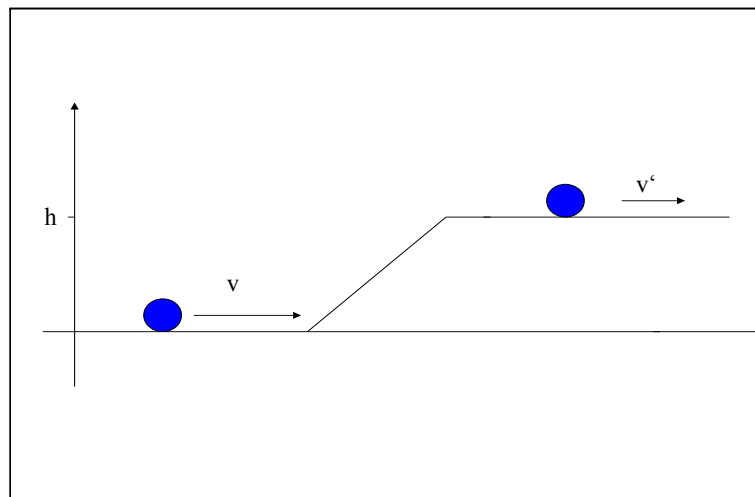


Figure 5:

In der klassischen Mechanik würden somit alle Teilchen mit $E > V_0$ die Barriere überwinden. Das quantenmechanische Resultat nähert sich für $E \gg V_0$ diesem Resultat.

¹⁰Wir greifen eine einzelne Kugel aus einem Kugelstrom heraus.

Im Folgenden soll nun die zeitliche Entwicklung eines Wellenpakets untersucht werden. Mit Hilfe dieses Wellenpakets kann der Teilchenstrom besser beschrieben werden¹¹, wobei es insbesondere auch möglich ist, das Verhalten eines einzelnen Elektrons zu untersuchen.

¹¹Die Orte der einzelnen Elektronen sind dann gemäß der GAUSS-Funktion verteilt. Die meisten Elektronen haben dennoch einen relativ scharfen Ort und man kann deshalb einen Elektronenstrahl auch über eine GAUSS-Verteilung beschreiben.

3. ZEITENTWICKLUNG EINES GAUSS-WELLENPAKETS

3.1. Betrachtung des Falles $E \geq V_0$. Im Falle diskreter Energieeigenwerte kennen wir bereits die allgemeine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung als Überlagerung der normierten Lösungen der zeitunabhängigen Gleichung:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ a_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \cdot \varphi(x, 0) \cdot dx\end{aligned}\tag{25}$$

Nun betrachten wir den Fall kontinuierlicher Energiewerte E , das Ergebnis der zeitunabhängigen Gleichung lieferte keine Einschränkungen an $E > V_0$. In diesem Fall erhält man die allgemeine Lösung durch:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E(k)t} \cdot \varphi_k(x) \cdot dk\tag{26}$$

wobei nun gilt:

$$\begin{aligned}E(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > V_0 := \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m} \\ \varphi_k(x) &: \text{Lösung der zeitunabhängigen Gleichung}\end{aligned}\tag{27}$$

Im Programm "QMV4Pr1.mws" wird dieses Integral über eine Reihe von Tricks gelöst, die am Ende dieses Skripts vorgestellt werden. Die Funktion $g(k)$ wird als GAUSS-Funktion gewählt¹²:

$$g(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}}\tag{28}$$

Man erhält eine recht anschauliche Animation, aus der im folgenden ein paar Bilder betrachtet werden sollen. Die Bilder stammen aus der Wahl:

$$\begin{aligned}k_0 &: = 10 \frac{1}{m} \\ K_0 &: = 9 \frac{1}{m}\end{aligned}\tag{29}$$

d.h. die Energie des Elektrons ist nur leicht größer als der Potenzialwall.

Wir betrachten im folgenden die Entwicklung der Teilchenzahldichte, d.h. die Bewegung eines Elektrons, das an einem abstossenden Potenzial gestreut wird.

¹²Die Messwerte - jeder einzelne ist nur im Rahmen der HEISENBERG-Unschärfebeziehung bekannt - streuen um einen Wert herum.

Man erhält die folgende zeitliche Entwicklung der nicht-normierten¹³ Teilchenzahldichte:

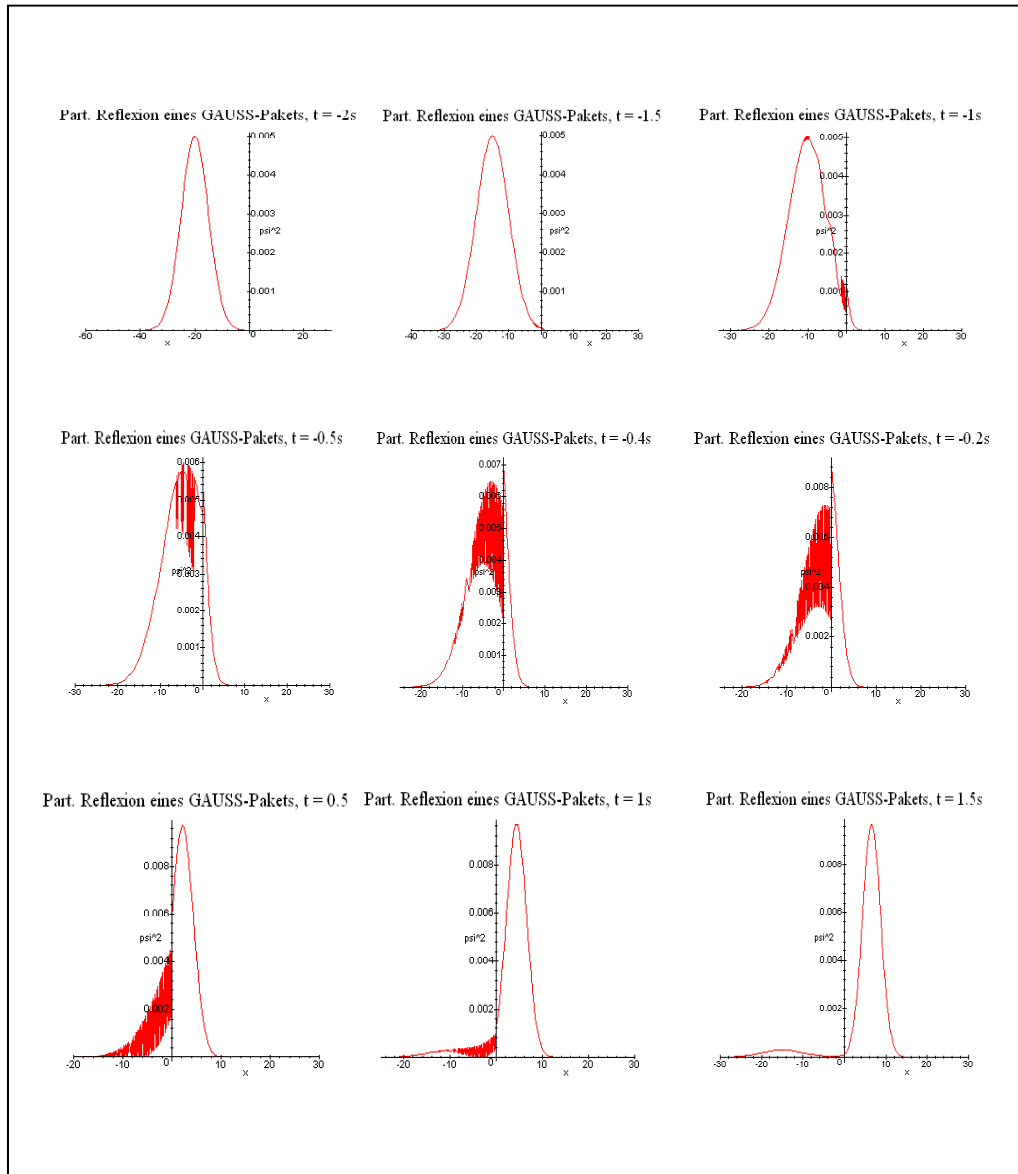


Figure 6: Zeitliche Entwicklung der Teilchenzahldichte $|\psi(x, t)|^2$.

¹³Es kommt nur auf den Effekt an!

Wie bereits diskutiert, ist der zu beobachtende Prozess im Rahmen der klassischen Mechanik für Teilchen nicht zu erwarten.

Betrachtet man die Bilder aus der zugehörigen Animation und vergleicht sie mit dem klassischen Bild der Kugel, die über den Berg rollt, so erkennt man einen frapierenden Unterschied, der aus der Wellennatur des Teilchens stammt. Es besteht eine - wenn auch geringere - Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron zentral zurückgestreut wird. Mit anderen Worten also nicht den Berg überläuft. Im klassischen Fall war die einzige Voraussetzung $E_{kin} > E_{pot}$ und auch wenn die kinetische Energie nur wenig größer gewesen wäre als die des Potenzialwalles, so würde die Kugel in jedem Fall über den Berg hinweg rollen. Für quantenmechanisch zu behandelnde Teilchen wie das Elektron gilt das nicht mehr. Man erhält eine immer größer werdende Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron zurückgestreut wird, je kleiner der Unterschied zwischen den Energien wird!

3.2. Betrachtung des Falles $T \approx 1$. Betrachten wir noch einmal die Lösung im Bereich I:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \left(e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \right) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ R &= \frac{k - q}{k + q} \\ q &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}\end{aligned}\tag{30}$$

gilt nun $E \gg V_0$, so wird q sehr groß und R sehr klein. Da R aber mathematisch gesehen, den Anteil der zurückgestreuten Dichte beschreibt - R soll an Reflexion erinnern - erhält man das klassische Ergebnis $R = 0$ nur im Falle $E \gg V_0$.

Dieses Ergebnis haben wir bereits bei der Diskussion der Stromdichten¹⁴ erhalten. Es lässt sich jedoch anschaulicher über eine Betrachtung der zeitlichen Entwicklung von $|\psi(x, t)|^2$ betrachten.

Man kann dieses Verhalten auch im Programm "QMV4Pr2.mws" testen¹⁵, denn schon für die Wahl:

$$k_0 : = 30 \frac{1}{m}\tag{31}$$

$$\begin{aligned}K_0 &: = 9 \frac{1}{m} \\ \sigma_k &: = 0.1 \frac{1}{m}\end{aligned}\tag{32}$$

¹⁴ Siehe Abbildung 4 in diesem Skript!

¹⁵ In diesem Programm können die Konstanten K_0 sowie k_0 beliebig gewählt werden. Es ist ebenfalls möglich, die Breite der GAUSS-Verteilung zu verändern. Diese sollte aber nur schmaler, d.h. $\delta_k > 0$ kleiner gewählt werden. Die Berechnung der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ setzt nämlich eine relativ schmale Verteilung voraus.

erhält man die folgende Entwicklung der nicht-normierten Teilchenzahldichte:

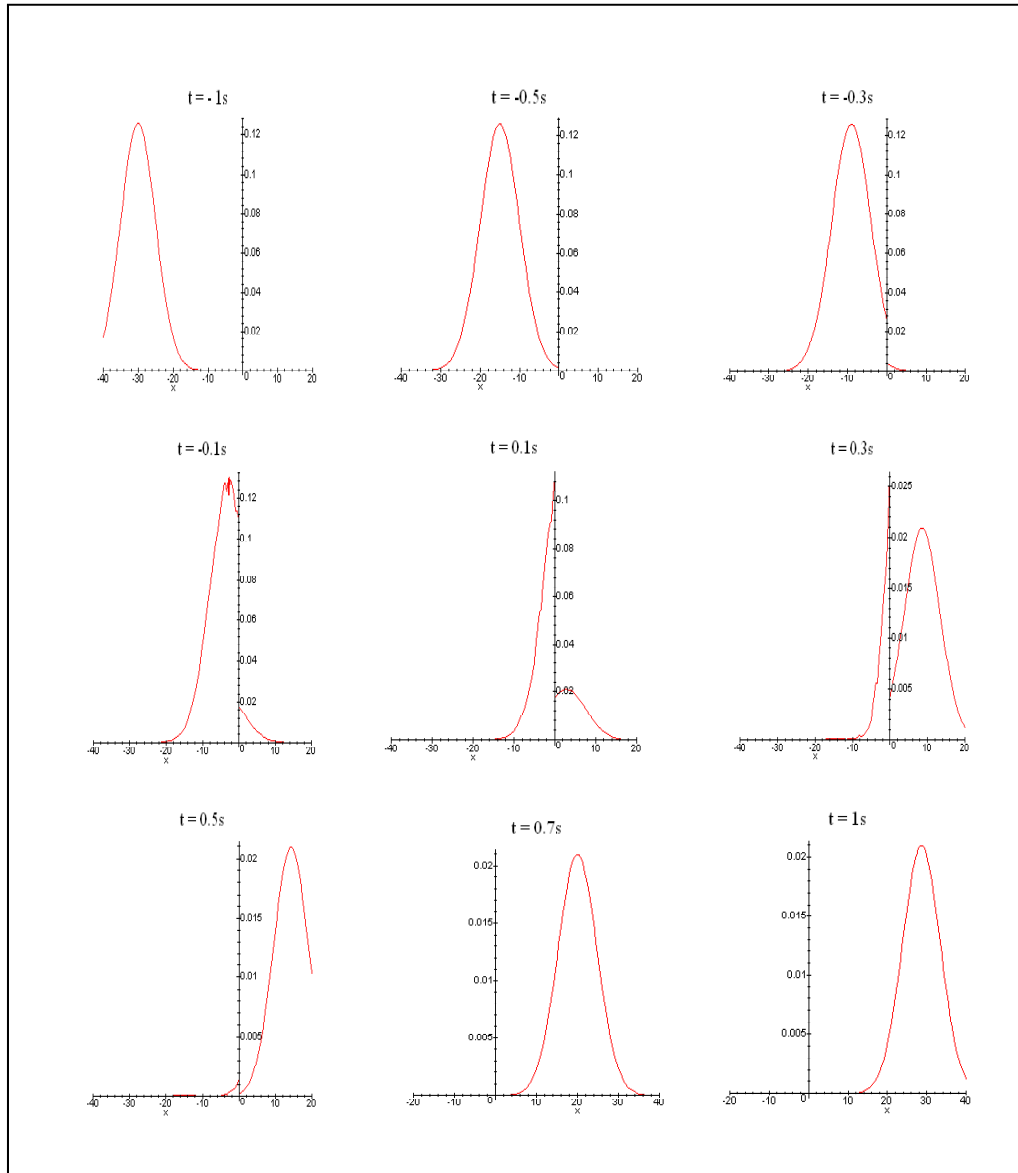


Figure 7: Zeitliche Entwicklung von $|\psi(x, t)|^2$.

Das Teilchen läuft wie im ersten Fall auf die Potenzialwand zu und wird im Gegensatz zur dortigen Entwicklung von der Potenzialbarriere praktisch nicht reflektiert¹⁶, verhält sich also im wesentlichen wie ein klassisches Teilchen.

Wir können aus diesem Verhalten vermuten, dass die Wahrscheinlichkeitsaussagen

¹⁶Im Programm erkennt man einen verschwindenden Anteil, dies ist nicht weiter verwunderlich, denn so beträchtlich ist der Unterschied zwischen K_0 und k_0 nicht.

der Quantenmechanik und der klassische Mechanik irgendwann sich stark annähern¹⁷, denn das Teilchen zeigt jetzt ein klassisch zu erwartendes Verhalten.

Man kann also erkennen, dass für sehr große Teilchenenergien keine Reflexion stattfindet, also ein dem klassischen Fall ähnliches Verhalten angenähert wird¹⁸. Zur Übung kann man das Programm "QMV4P2.mws" benutzen und die dort vorgeschlagenen Fälle (oder andere) durchrechnen lassen und betrachten.

3.3. Zur mathematischen Entwicklung der Wellenfunktion. Die Entwicklung der Wellenfunktion verläuft im wesentlichen genauso wie im Falle der freien SCHRÖDINGER-Gleichung¹⁹:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E(k)t} \cdot \varphi_k(x) \cdot dk \\ E(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ V_0 &: = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m} \Rightarrow K_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \\ g(k) &= e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}}\end{aligned}$$

Die Verteilungsfunktion $g(k)$ muss nun so schmal gewählt werden, dass sie die folgende Bedingung erfüllt:

$$g(k) \approx 0 \text{ für alle } 0 \leq k < K_0 \quad (33)$$

Lösung im Bereich $x < 0$. In diesem Bereich des Intervalles haben wir als Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung die Funktion:

$$\varphi_k(x) = e^{ikx} + R(k) \cdot e^{-ikx}$$

erhalten. Mit diesem Ergebnis folgt dann:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \left(e^{ikx} + R(k) \cdot e^{-ikx} \right) \cdot dk \\ &\approx \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \left(e^{ikx} + R(k) \cdot e^{-ikx} \right) \cdot dk\end{aligned}$$

¹⁷In diesem Zusammenhang sei auf die Diskussion des BOHR-Korrespondenzprinzips im Skript 14 zur *Quantenmechanik* hingewiesen.

¹⁸Man beachte, dass die Wahrscheinlichkeit für eine Reflexion trotzdem nicht Null ist, sondern eben nur sehr klein. Ob man aus diesem Ergebnis schließen darf, dass die Quantenmechanik in die klassische Mechanik irgendwann übergeht ist Thema der letzten Vorlesungen zur Quantenmechanik, ab Vorlesung 26 ff.

¹⁹Siehe Skript 1 zur *Quantenmechanik*.

Die Berechnung des Integrals lässt sich in zwei Teile aufspalten und man erhält wegen (33):

$$I_1(x, t) := \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} e^{ikx} dk \approx \int_0^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} e^{ikx} dk$$

Dieses Integral wird über die bereits bekannte quadratische Ergänzung auf eine Form wie:

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha k^2} dk = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

gebracht:

$$I_1(x, t) = e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{ik_0^2 t - 2ik_0 x + 2x^2 \sigma_k^2}{1 + 2i\sigma_k^2 t} \right)} \frac{2\sigma_k \sqrt{\pi}}{\sqrt{1 + 2i\sigma_k^2 t}} \quad (34)$$

Das zweite Integral hat die Gestalt:

$$\begin{aligned} I_2(x, t) &: = \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \cdot R(k) \cdot e^{-ikx} dk \\ &= \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \cdot \frac{k - q(k)}{k + q(k)} \cdot e^{-ikx} dk \\ &\approx \int_0^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \cdot \frac{k - \sqrt{k^2 - K_0^2}}{k + \sqrt{k^2 + K_0^2}} \cdot e^{-ikx} dk \end{aligned}$$

Da die Verteilungsfunktion hinreichend schmal ist, kann man

$$R(k) \approx R(k_0)$$

setzen und $R(k_0)$ vor das Integral ziehen:

$$I_2(x, t) \approx \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - K_0^2}}{k_0 + \sqrt{k_0^2 + K_0^2}} \int_0^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \cdot e^{-ikx} dk \quad (35)$$

Dieses Integral lässt sich wiederum auf die bereits bekannte Weise lösen und man erhält:

$$I_2(x, t) \approx \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - K_0^2}}{k_0 + \sqrt{k_0^2 + K_0^2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{ik_0^2 t + 2ik_0 x + 2x^2 \sigma_k^2}{1 + 2i\sigma_k^2 t} \right)} \frac{2\sigma_k \sqrt{\pi}}{\sqrt{1 + 2i\sigma_k^2 t}} \quad (36)$$

Somit erhält man für den Bereich $x < 0$ die Wellenfunktion:

$$\psi_{x < 0}(x, t) \approx \frac{2\sigma_k \sqrt{\pi}}{\sqrt{1 + 2i\sigma_k^2 t}} \left[e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{ik_0^2 t - 2ik_0 x + 2x^2 \sigma_k^2}{1 + 2i\sigma_k^2 t} \right)} + \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - K_0^2}}{k_0 + \sqrt{k_0^2 + K_0^2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{ik_0^2 t + 2ik_0 x + 2x^2 \sigma_k^2}{1 + 2i\sigma_k^2 t} \right)} \right] \quad (37)$$

Lösung im Bereich $x > 0$. In diesem Bereich haben wir die folgende Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung erhalten:

$$\begin{aligned}\varphi_k(x) &= T(k) \cdot e^{iq(k)x} = T(k) \cdot e^{i\sqrt{k^2 - K_0^2}x} \\ T(k) &= \frac{2k}{k + \sqrt{k^2 - K_0^2}}\end{aligned}\quad (38)$$

Somit hat das zu berechnende Integral die folgende Gestalt:

$$\psi_{x>0}(x, t) \approx \int_{K_0}^{\infty} e^{-i\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \cdot T(k) \cdot e^{i\sqrt{k^2 - K_0^2}x} dk \quad (39)$$

Mit dem gleichen Argument wie für die Funktion $R(k)$ kann man $T(k)$ durch $T(k_0)$ ersetzen und vor das Integral ziehen:

$$\psi_{x>0}(x, t) \approx \frac{2k_0}{k_0 + \sqrt{k_0^2 - K_0^2}} \int_{K_0}^{\infty} e^{-i\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \cdot e^{i\sqrt{k^2 - K_0^2}x} dk$$

Die Wurzel $\sqrt{k^2 - K_0^2}$ des Exponenten nähern wir durch die TAYLOR-Entwicklung um $k = k_0$:

$$\begin{aligned}\sqrt{k^2 - K_0^2} &\approx \sqrt{k^2 - K_0^2}|_{k=k_0} + (k - k_0) \frac{\partial}{\partial k} \sqrt{k^2 - K_0^2}|_{k=k_0} \\ \sqrt{k^2 - K_0^2} &\approx \sqrt{k_0^2 - K_0^2} + \frac{k_0(k - k_0)}{\sqrt{k_0^2 - K_0^2}}\end{aligned}\quad (40)$$

Das dann noch zu lösende Integral wird auf die bekannte Weise berechnet und man erhält die folgende Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\psi_{x>0}(x, t) &\approx \frac{2k_0\sigma_k\sqrt{2 + 4it\sigma_k^2}}{k_0 + \sqrt{k_0^2 - K_0^2} (1 + 2it\delta_k^2)} e^{i\sqrt{k_0^2 - K_0^2}x} \cdot \\ &\cdot e^{-\frac{k_0^2}{4} (2i\sqrt{k_0^2 - K_0^2}tk_0^2 - 2i\sqrt{k_0^2 - K_0^2}tK_0^2 - 4ik_0^2x + 4iK_0^2x + 4x^2\sigma_k^2\sqrt{k_0^2 - K_0^2})}\end{aligned}\quad (41)$$