

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 5

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Behandelt wird in dieser Vorlesung der Fall, dass ein Elektron mit einer Energie $E < V_0$ auf den Potenzialwall zuläuft.

1. DER EINDIMENSIONALE POTENZIALWALL: TOTALREFLEXION

Maple-Dateien zur Vorlesung:

- QMV5Pr1.mws (Stationäre Lösung, Beispiel für ein Wellenpaket)
- QMV5Pr2.mws (Wellenpaket)

Wir betrachten in dieser Vorlesung die gleiche Potenzialsituation wie in der letzten Vorlesung¹. Neu ist jetzt nur, dass die Energie des einfallenden Teilchenstroms geringer ist als die Energie des Potenzialwalls. Die folgende Graphik verdeutlicht diesen Sachverhalt:

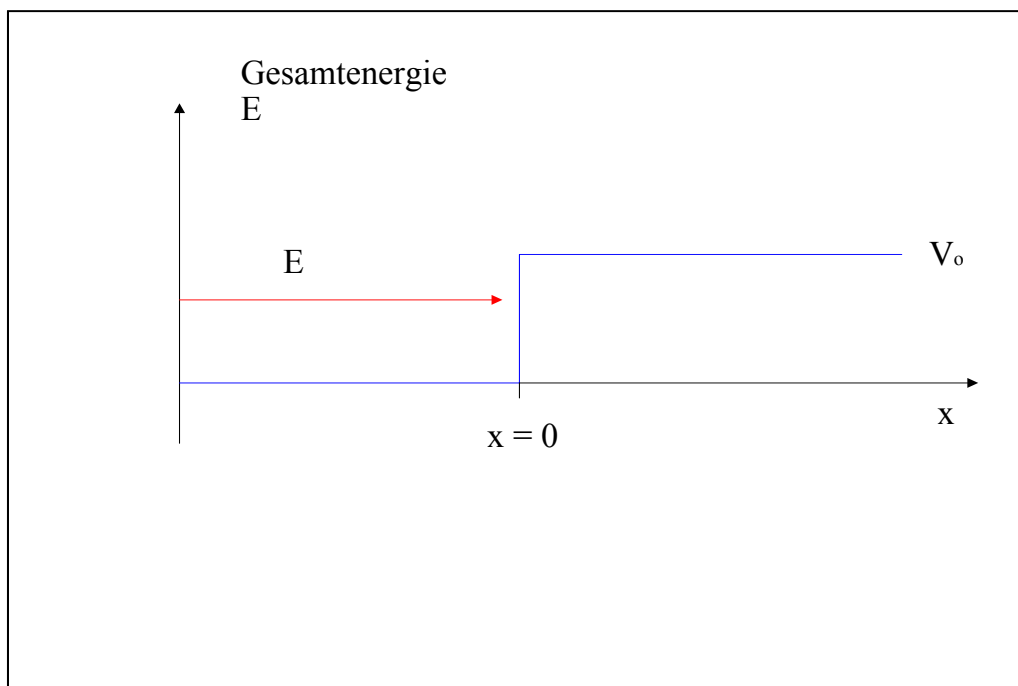


Figure 1: Energiediagramm

¹Siehe Skript zur 4. Vorlesung *Quantenmechanik*.

In einem klassischen Vergleich würden wir für ein einzelnes Teilchen² nun erwarten, dass es den Berg nicht hinaufrollen kann:

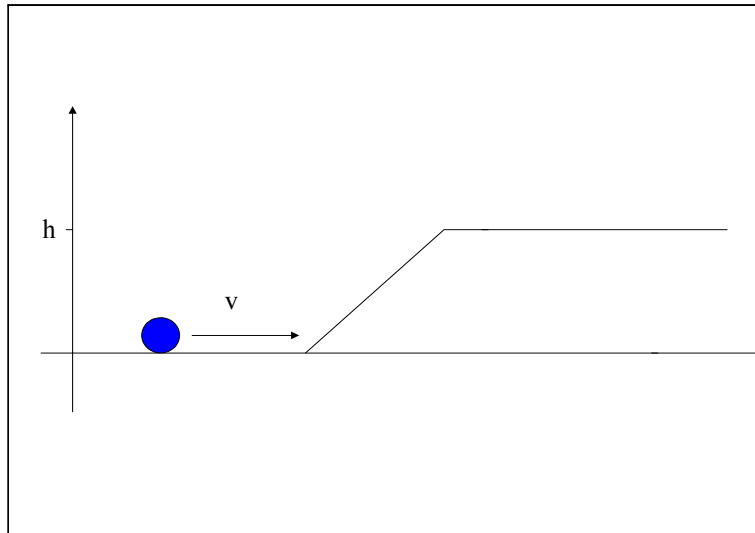


Figure 2:

Es würde nämlich nun der Fall eintreten, dass die kinetische Energie des Teilchens zu klein ist, um auf den Berg hinaufzurollen:

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &< E_{\text{pot}} \\ \frac{1}{2}mv^2 &< mgh \end{aligned} \quad (1)$$

Mathematisch ausgedrückt, hätte das Teilchen (die Kugel) eine negative kinetische Energie auf dem Berg:

$$E'_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv' = \frac{1}{2}mv^2 - mgh < 0 \quad (2)$$

was natürlich Unsinn ist! Klassisch betrachtet kann das Teilchen nicht auf den Berg rollen. Es erreicht einen Umkehrpunkt und wird "reflektiert". Im Programm "QMV5Pr1.mws" wird nun dieser Fall mit Maple behandelt. Das Ergebnis für den Bereich $x < 0$ ist schon aus der letzten Vorlesung bekannt und kann hier übernommen werden.

Bereich $x < 0$:

²Siehe Vorlesung 4 zur *Quantenmechanik*, natürlich wird die obige Potenzialsituation auch für ein einzelnes Elektron bzw. ein GAUSS-Wellenpaket untersucht.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_1(x) - E \varphi_1(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_1(x) = 0 \quad (3)$$

Über die Substitution $k^2 := \frac{2m}{\hbar^2} E$ wird im Programm "QMV5Pr1.mws" die Funktion:

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \quad (4)$$

als Lösung errechnet.

Die *allgemeine Lösung für den Bereich $x < 0$* ist somit:

$$\psi_1(x, t) = \varphi_1(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \left(e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx} \right) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (5)$$

Für die *Stromdichte* erhält man wieder:

$$\mathbf{j} = j_0 \cdot \mathbf{e}_x - j_R \cdot \mathbf{e}_x = \frac{\hbar k}{m} \cdot \mathbf{e}_x - \frac{\hbar k}{m} |R|^2 \cdot \mathbf{e}_x \quad (6)$$

Bereich $x > 0$:

Man erhält hier:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_2(x) + V_0 \cdot \varphi_2(x) = E \cdot \varphi_2(x) \quad (7)$$

bzw.:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_2(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \cdot \varphi_2(x) = 0 \quad (8)$$

Substituiert man:

$$\rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (9)$$

so erhält man:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_2(x) - \rho^2 \cdot \varphi_2(x) = 0 \quad (10)$$

eine gewöhnliche Differenzialgleichung, die man mit Maple leicht lösen kann. Die Lösung lautet:

$$\varphi_2(x) = C_1 e^{\rho x} + C_2 e^{-\rho x} \quad (11)$$

Damit die Teilchenzahldichte endlich bleibt:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} |\varphi_2(x)|^2 < \infty \quad (12)$$

muss $C_1 = 0$ gelten. Die zweite Konstante C_2 nennen wir wieder T. Damit erhalten wir im Bereich $x > 0$ die Lösung:

$$\varphi_2(x) = T \cdot e^{-\rho x} \quad (13)$$

Die *allgemeine Lösung für den Bereich $x > 0$* ergibt sich somit zu:

$$\psi_2(x, t) = \varphi_2(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = T \cdot e^{-\rho x} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (14)$$

Für die *Stromdichte in diesem Bereich* erhält man dann, da es sich bei $\varphi_2(x)$ um eine reelle Funktion handelt³:

$$\mathbf{j}_T = 0 \quad (15)$$

Randbedingungen für den Übergang zwischen beiden Bereichen:

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

$$\begin{aligned} \varphi_1(0) &= \varphi_2(0) \\ \frac{\partial}{\partial x} \varphi_1(0) &= \frac{\partial}{\partial x} \varphi_2(0) \end{aligned} \quad (16)$$

Aus diesem Gleichungssystem errechnet Maple die beiden fehlenden Konstanten R und T zu⁴:

$$\begin{aligned} T &= 2 \frac{ik}{ik - \rho} \\ R &= \frac{ik + \rho}{ik - \rho} \end{aligned} \quad (17)$$

Als Beispiel für die entstehende Teilchenzahldichte, betrachten wir den Fall:

$$\begin{aligned} V_0 &= 1.5 \cdot E \\ m &: = 1, \hbar := 1 \end{aligned} \quad (18)$$

Man erhält die folgende Teilchenzahldichte:

Betrachtet man diese Verteilung, so fällt auf, dass die Teilchenzahldichte im Bereich $x > 0$ nicht sofort verschwindet. Es gibt einen Bereich $x > 0$, in dem es eine gewisse Wahrscheinlichkeit dafür gibt, dass Teilchen in dem klassisch verbotenen Bereich nachgewiesen werden können!! Im klassischen Fall wäre das in jedem Fall $E < V_0$ unmöglich gewesen. Die Teilchen werden immer reflektiert, denn man erhält als Ergebnis:

$$\frac{j_R}{j_0} = R^2 = \left| \frac{ik + \rho}{ik - \rho} \right|^2 = 1 \quad (19)$$

wie man es auch in der klassischen Mechanik erwarten würde.

Da R^2 den Anteil an reflektierter Teilchenzahldichte angibt, besagt dieses Ergebnis, dass die Welle und damit das Teilchen total reflektiert wird. Trotzdem besteht ein wesentlicher Unterschied: wegen des Auftretens der räumlich gedämpften Welle $e^{-\rho x}$ besitzt das Teilchen eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit dafür, daß es in den klassisch verbotenen Bereich eindringt bzw. dort nachgewiesen wird.

Diese Teilchenzahldichte nimmt mit wachsendem x exponentiell ab und ist für Werte

³Zur Erinnerung: Im eindimensionalen Fall erhält man die Stromdichte aus:

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$$

siehe Skript zur 4. Vorlesung *Quantenmechanik*, Gleichung (6).

⁴Siehe im Programm "QMV5Pr1.mws".

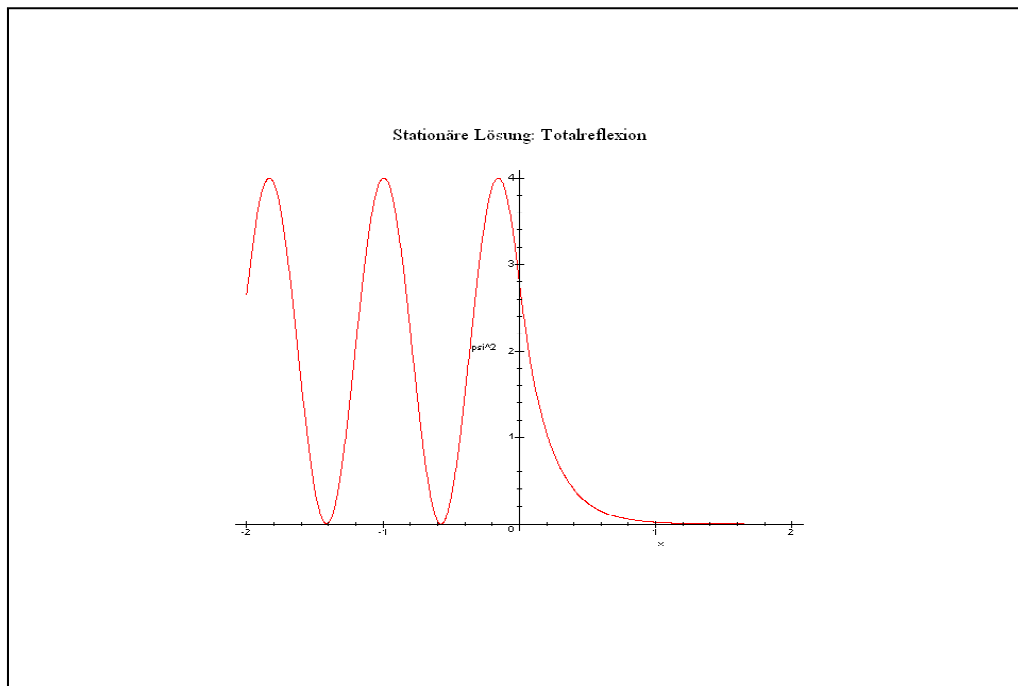


Figure 3: Stationäre Teilchenzahldichte

von x , die größer als die sogenannte "Reichweite" $\frac{1}{\rho}$ der gedämpften Welle sind, vernachlässigbar klein. Es ist klar, dass je kleiner ρ ist, das heißt je geringer der Unterschied zwischen E und $V_0 > E$ ist, umso größer ist die Eindringtiefe in das klassisch verbotene Gebiet.

Betrachten wir dazu als Beispiel den Fall:

$$V_0 - E = 0.1 \text{ Nm} \quad (20)$$

man erhält die folgende Verteilung der Teilchenzahldichte:

Man kann schon beim Betrachten dieser Abbildung erkennen, dass nun der Bereich im klassisch verbotenen Gebiet größer ist, als im ersten Beispiel, die nächste Abbildung zeigt aber einen direkten Vergleich der beiden Fälle:

Im folgenden werden wir nun wie auch in der letzten Vorlesung die Bewegung eines Elektrons beobachten, dessen Energie kleiner ist, als die potenzielle Energie der Potenzialwand.

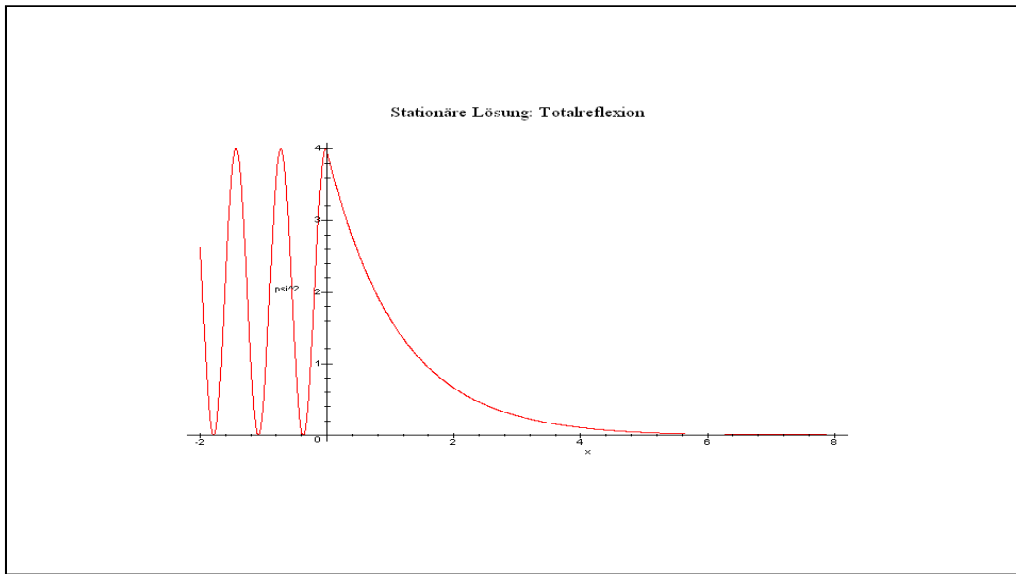


Figure 4: Teilchenzahldichte im Falle eines geringen Unterschieds zwischen V_0 und E .

2. ZEITENTWICKLUNG EINES GAUSS-WELLENPAKETS

Im Falle diskreter Energieeigenwerte kennen wir bereits die allgemeine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung als Überlagerung der normierten Lösungen der zeitunabhängigen Gleichung:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ a_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \varphi(x, 0) \cdot dx\end{aligned}\tag{21}$$

Nun betrachten wir wieder den Fall kontinuierliche Energiewerte E , die Lösung lieferte keine Einschränkungen an $V_0 > E$. In diesem Fall erhält man die allgemeine Lösung durch:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E(k)t} \cdot \varphi_k(x) \cdot dk\tag{22}$$

wobei nun gilt:

$$\begin{aligned}E(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < V_0 \\ \varphi_k(x) &: \text{Lösung der zeitunabhängigen Gleichung.}\end{aligned}\tag{23}$$

Im Programm "QMV5Pr1.mws" wird dieses Integral über eine Reihe von Tricks gelöst, die an dieser Stelle nicht weiter ausgeführt werden sollen⁵. Die Funktion

⁵So wird das Potenzial V_0 auch als ein Ausdruck $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ mit $k = K_0$ verstanden und nun werden nur $k < K_0$ im Integral behandelt.

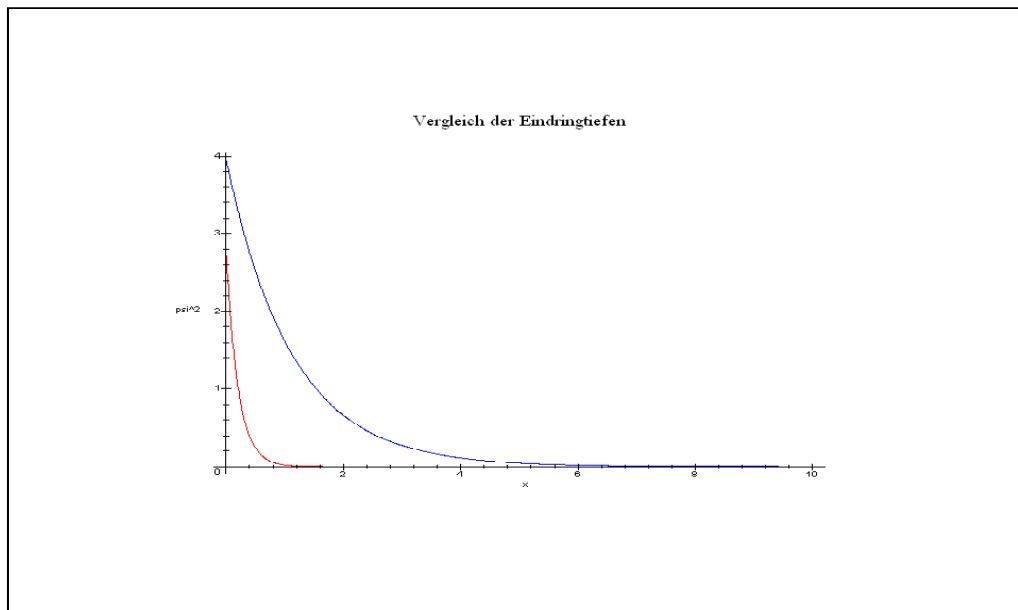


Figure 5: Vergleich der Eindringtiefen

$g(k)$ wird als GAUSS-Funktion gewählt⁶:

$$g(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} \quad (24)$$

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

$$k_0 = 9.8 \frac{1}{m} \quad (25)$$

$$K_0 = 10 \frac{1}{m} \quad (26)$$

$$\sigma_k = 0.05 \frac{1}{m}$$

Mit anderen Worten, die Energie des Elektrons ist nur etwas geringer als der Potenzialwall. Aus diesem Grund ist eigentlich ein deutliches Eindringen des Wellenpakets in den Potenzialbereich zu erwarten.

Wir betrachten im folgenden die Entwicklung der nicht-normierten⁷ Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h. die Bewegung eines Elektrons, das an einem abstossenden Potenzial gestreut wird. Als problematisch erweist sich dabei, dass die Breite des GAUSS-Pakets im k -Raum wiederum recht schmal sein muss, um die mathematische Näherungen zu gewährleisten. Im Ergebnis ist dann jedoch gemäß der Unbestimmtheitsrelation HEISENBERGS die Verteilung im Ortsraum relativ breit. Dies wirkt sich nun in

⁶Die Messwerte der Impulswerte streuen um einen Wert herum. Dabei ist natürlich zu beachten, dass jeder einzelne Wert nur im Rahmen der HEISENBERG-Unschäferelation gemessen werden kann.

⁷Da es nur um den Effekt geht, braucht die Normierung nicht beachtet zu werden.

der folgenden Abbildung so aus, dass man entweder nur einen Teil des Wellenpakets betrachten kann und dann die Eindringung beobachten kann oder man beobachtet das gesamte Paket und sieht dann nicht so deutlich das Eindringen in den klassisch verbotenen Teil⁸. In der folgenden Abbildung ist die zweite Möglichkeit dargestellt:

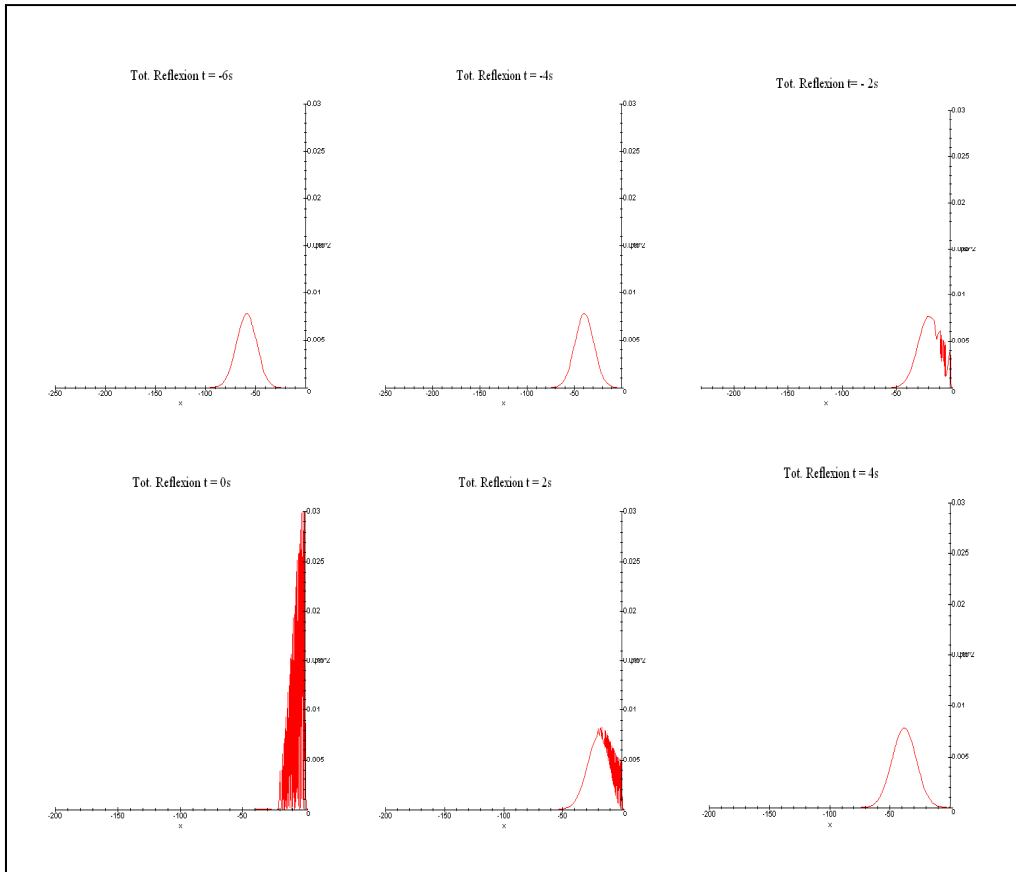


Figure 6: Zeitliche Entwicklung von $|\psi(x, t)|^2$.

⁸Dieser Bereich ist im Vergleich zur Breite des Pakets einfach zu schmal! In der Animation, die im Programm "QMVorl5Pr1.mws" ausgerechnet wird ist das Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich zu erkennen.

2.1. Zur mathematischen Entwicklung der Wellenfunktion. Die Entwicklung der Wellenfunktion verläuft im wesentlichen⁹ genauso wie im Falle der freien SCHRÖDINGER-Gleichung¹⁰:

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

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

$$g(k) \approx 0 \text{ für alle } 0 \leq k < K_0 \quad (27)$$

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, wobei:

$$R(k) = \frac{k - i\rho}{k + i\rho}, \quad \rho = \sqrt{K_0^2 - k^2}$$

Jede komplexe Zahl $z = a + ib$ kann geschrieben werden als¹¹:

$$z = \sqrt{a^2 + b^2} e^{i \cdot \arctan(\frac{b}{a})}$$

Aus diesem Grund kann man für die Funktion $R(k)$ auch schreiben:

$$R(k) = |R(k)| e^{2i \cdot \arctan(\frac{\rho}{k})} = e^{2i \cdot \arctan\left(\frac{\sqrt{K_0^2 - k^2}}{k}\right)}$$

Mit diesem Ergebnis folgt dann:

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

⁹Da die entstehenden Terme sehr lang werden, die grundsätzliche Idee aber immer die selbe ist, werden in diesem Abschnitt nur die wichtigsten Abweichungen von den bisherigen Rechnungen diskutiert.

¹⁰Siehe Skript 1 zur *Quantenmechanik*.

¹¹Siehe *Einführung in die Quantenphysik*, Vorlesung (5), Gleichung (28).

Dieses Integral ist so nicht lösbar! Da aber die Verteilungsfunktion $g(k)$ um $k = k_0$ hinreichend schmal ist, kann man den Ausdruck für $R(k)$ in eine TAYLOR-Reihe um $k = k_0$ verwandeln:

$$\arctan\left(\frac{\sqrt{K_0^2 - k^2}}{k}\right) \approx \arctan\left(\frac{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}}{k_0}\right) - \frac{2 \cdot k_0^2}{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}}(k - k_0) + O((k - k_0)^3)$$

Das hieraus entstehende Integral:

$$\psi_{x < 0}(x, t) \approx \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \left(e^{ikx} + e^{2i \cdot \left[\arctan\left(\frac{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}}{k_0}\right) - \frac{2 \cdot k_0^2}{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}}(k - k_0) \right]} \cdot e^{-ikx} \right) \cdot dk \quad (28)$$

lässt sich über die bekannte Methode lösen¹².

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

$$\begin{aligned} \varphi_k(x) &= T(k) \cdot e^{-q(k)x} = T(k) \cdot e^{-\sqrt{k^2 - K_0^2}x} \\ T(k) &= \frac{2k}{k + i\sqrt{k^2 - K_0^2}} \end{aligned} \quad (29)$$

Somit hat das zu berechnende Integral die folgende Gestalt:

$$\psi_{x > 0}(x, t) \approx \int_{K_0}^{\infty} e^{-i \frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \cdot T(k) \cdot e^{-\sqrt{k^2 - K_0^2}x} dk \quad (30)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \sqrt{k^2 - K_0^2} &\approx \sqrt{k^2 - K_0^2} \big|_{k=k_0} + (k - k_0) \frac{\partial}{\partial k} \sqrt{k^2 - K_0^2} \big|_{k=k_0} \\ \sqrt{k^2 - K_0^2} &\approx \sqrt{k_0^2 - K_0^2} + \frac{k_0(k - k_0)}{\sqrt{k_0^2 - K_0^2}} \end{aligned} \quad (31)$$

Die aus dieser Entwicklung folgenden Integrale lassen sich dann alle wiederum nach dem bekannten Schema lösen.

¹² Im 2. Programm zur Vorlesung kann die komplette Rechnung von Maple durchgeführt auch im allgemeinen Fall beobachtet werden. Dazu ist nur notwendig die gewählten Voreinstellungen für die einzelnen Variablen nicht an Maple zu übergeben!