

Lösungen zur Übung 2.2-5

Lösung der Schrödinger-Gleichung 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:

$$\begin{aligned}k &= \pm \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \right)^{1/2} = \frac{(2m \cdot E)^{1/2}}{\hbar} = \frac{(m^2 \cdot v^2)^{1/2}}{\hbar} \\ k &= \frac{p}{\hbar} := \frac{2\pi}{\lambda}\end{aligned}$$

Dabei haben wir von folgenden Beziehungen Gebrauch gemacht:

- Die Gesamtenergie *muß* ausschließlich kinetisch sein - das Potential ist ja $= 0$ - also gilt $E = \frac{1}{2}mv^2$.
- 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](#)).

$\psi_1(\mathbf{x})$ löst die Schrödinger-Gleichung für geeignet 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 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$.

- Wie auch immer es genau aussieht, das ist etwas wellenartiges, und \mathbf{k} ist bis auf das 2π so etwas wie die Wellenzahl $1/\lambda$, weiter bis bis auf das \hbar der Impuls $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ - und sogar die Energie E steckt codiert in \mathbf{k} .
- Es ist schlicht die beherrschende Größe, in der alle Eigenschaften des Teilchens stecken!
- In drei Dimensionen ist \mathbf{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 $V(\mathbf{x}) = V_0$. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung 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 $\psi_2(\mathbf{x}) = C \cdot \exp(-\alpha \cdot \mathbf{x})$ 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 $\psi_2(\mathbf{x}) = C \cdot \exp(-\alpha \cdot \mathbf{x})$ liefert hier:

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

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

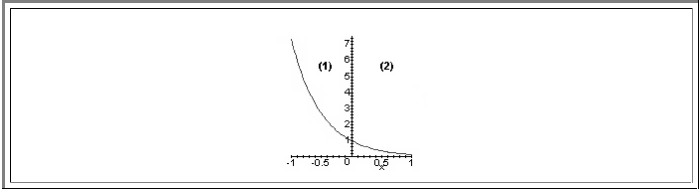
$$\begin{aligned}\alpha^2 \psi_2(\mathbf{x}) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2(\mathbf{x}) &= 0 \\ \alpha^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\end{aligned}$$

- 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:

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

- 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 Teilchen 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 $|\psi_2(\mathbf{x})|^2 \Rightarrow 0$ 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 $|\psi_2(\mathbf{x})|^2$ mit $\exp-(2\,000)^{1/2} = 3,78 \cdot 10^{-20}$ multipliziert - spätestens jetzt ist die Wahrscheinlichkeit ziemlich dicht bei Null!

[Zurück zur Aufgabe](#)