Universität Leipzig, Fakultät für Physik und Geowissenschaften

Experimentalphysik
Modul PH-EP4 / PH-DP-EP4

Zusammenfassung für Vorlesung 6 (30. April 2009) und 7 (04. Mai), SS 2009

3 Grundlagen der Quantenmechanik

Demtröder Exp. Phys. 3, Kap. 4
Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, können in der Quantenmechanik für die Bewegung von Teilchenbahnen keine genauen Trajektorien mehr angegeben werden. Vielmehr tritt an die Stelle der exakten Bahnkurve die Wahrscheinlichkeit

$$W(x, y, z, t)dV = \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2 dV \tag{1}$$

im Volumenelement $dV = dxdydz$ das Teilchen zum Zeitpunkt t zu finden. Diese Wahrscheinlichkeit ist durch das Betragsquadrat $\rho(x) = \left|\psi(x)\right|^2$der Materiewellenfunktion Ψ determiniert. Die Materiewellenfunktion wiederum ist die Lösung der Schrödingergleichung um die es im folgenden Kapitel gehen soll.

3.1 Die Schrödingergelichung

- Die von Erwin Schrödinger 1926 aufgestellte und nach ihm benannte partielle Differentialgleichung bildet die Grundlage der Quantenmechanik. Ihre Lösungen sind (Materie-) Wellenfunktionen $\psi(x, y, z, t)$
- Ähnlich wie bei den Newtonschen Axiomen ist eine Herleitung aus grundlegenderen Prinzipien nicht möglich. Man kann jedoch mit Hilfe von de Broglies Bild der Materiewellen die Form der Schrödingergleichung motivieren (*Siehe u.a. Demtröder Exp.Phys.Bd.3, Kap.4.1*)
- Die dreidimensionale stationäre bzw. zeitabhängige Schrödingergleichung für ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m lautet

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad \mathit{bzw.} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}, t) + V\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) \tag{2}$$

  mit dem reduzierten Plankschen Wirkungsquantum $\hbar = h/2\pi$, dem Ortsvektor $\vec{x} = (x, y, z)$, dem Laplace Operator $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$, der Wellenfunktion ψ, dem Potential V und dem Energieeigenwert E.
- Die Differentialgleichungen (2) sind linear und homogen. Das heisst: Sind ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Gl. 2, so ist auch die Linearkombination $\psi_3 = a \cdot \psi_1 + b \cdot \psi_2$ eine Lösung (Superpositionsprinzip).
- Die Lösungen der Schrödingergleichung sind im allgemeinen komplexe Funktionen ψ. Wichtig ist, dass die Wellengleichung ψ nicht direkt messbar ist, sondern nur ihr Betragsquadrat $\left|\psi\right|^2$. Dieses ist wegen $\left|\psi\right|^2 = \psi \cdot \psi^*$ immer reel (ψ^* ist das komplex konjugierte von ψ).

- Für viele konkrete Probleme ist die Schrödingergleichung nicht direkt analytisch lösbar sondern muss numerisch berechnet werden. Jedoch existieren analytische Lösungen für einfache Modellsysteme (harmonischer Oszillator, Potentialtopf,...) die ein qualitatives Verständnis vieler quantenmechanische Erscheinungen zulassen.

3.2 Anwendungen in einer Dimension

Für den eindimensionalen Fall $\psi(\vec{x}) \equiv \psi(x)$ vereinfacht sich die stationäre Version der Schrödingergleichung (2) zu

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

Im folgenden soll diese Gleichung für einige Beispiele und Modellsysteme gelöst und somit die Wellenbechreibung von Teilchen und die daraus folgenden physikalischen Konzepte illustriert werden.

3.2.1 Das freie Teilchen

- Ein Teilchen wird als kräftefrei uns somit als frei bezeichnet, wenn es sich in einem konstanten Potential ϕ_0 bewegt. Wegen $\vec{F} = -grad(\phi_0)$ ist die Kraft auf das Teilchen dann nämlich Null. Durch geeignete Wahl des Energienullpunktes kann $\phi_0 = 0$, d.h. $V \equiv 0$ gesetzt werden.
- Die stationäre Schrödingergleichung eines freien Teilchens in einer Dimension lautet dann

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{4}$$

- Für ein freies Teilchen ($V \equiv 0$) der Masse m, welches sich mit gleichförmiger Geschwindigkeit v in x-Richtung bewegt gilt wegen $p = \hbar k$ für die Energie

$$E \equiv E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{5}$$

- Somit reduziert sich Gleichung (4) auf

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \tag{6}$$

welche die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx) \tag{7}$$

besitzt.

- Für die zeitabhängige Version der Schrödingergleichung (2) für ein freies Teilchen kann dann die Lösung durch

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \psi(x) \cdot \exp(-i\omega t) \\ &= A \cdot \exp[i(kx - \omega t)] + B \cdot \exp[-i(kx + \omega t)]\end{aligned} \tag{8}$$

angegeben werden was nichts anderes ist als eine ebene Welle. Diese räumlich und zeitlich nicht lokalisierte und somit unendlich ausgedehnte Welle spiegelt den den Befund eines freien, nicht näher lokalisierten Teilchens wieder.
Einer solchen Welle wird der Impuls $p = \hbar k$ und die Energie $E = \hbar\omega$ zugeordnet.

- Während in der Elektrodynamik eine lineare Dispersionsrelation $\omega(k) = k \cdot c$ gilt, ist für quantenmechanische Objekte wegen $E = \hbar\omega = p^2/2m$ und $p = \hbar k$ eine quadratische Dispersionsrelation gültig.

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} \cdot k^2 \tag{9}$$

- Da neben der ebenen Welle auch die Superposition von ebenen Wellen mit verschiedenen Wellenzahlen ($\widehat{=}$ Impulsen) k

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\left[i(kx - \omega t)\right] dk \tag{10}$$

Lösungen der freien Schrödingergleichung darstellen, kann durch geeignete Wahl von Gewichtungsfaktoren $A(k)$ ein beliebig genau lokalisiertes Teilchen beschrieben werden (vgl. auch Fourier-Transformation). Dieses besitzt dann aber keinen exakt definierten Impuls und keine exakt definierte Energie (vgl. Unschärferelation).

- Wie Eingangs erwähnt, ist die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen, welches durch die Wellenfunktion ψ beschrieben wird im Raumvolumen V zum Zeitpunkt t anzutreffen gegeben durch

$$W(x, y, z, t)) = \int_V \left|\psi(x, y, z, t)\right|^2 dV \quad . \tag{11}$$

Für eine Wellenfunktion ψ muss dabei immer die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z, t)\, dx\, dy\, dz \equiv 1 \tag{12}$$

erfüllt sein. Damit wird dem Umstand, dass sich das Teilchen letztendlich irgendwo im gesamten Raum befinden muss, Rechnung getragen.

3.2.2 Potentialstufe

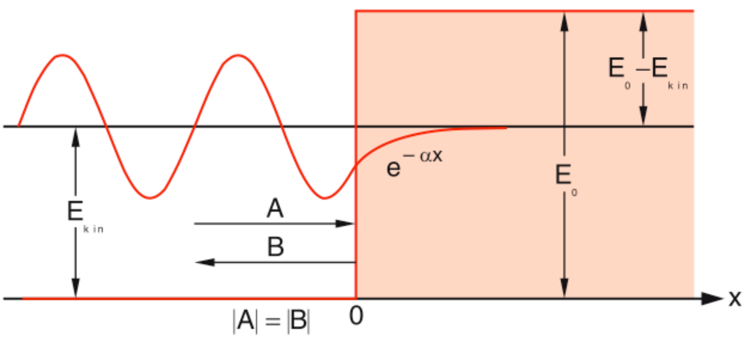

Abbildung 1: Skizze einer Potentialstufe bei $x = 0$. Für $x < 0$ ist das Potential $V = 0$ und für $x \geq 0$ ist das Potential $V \equiv const = E_0$. Die in rot dargestellte Materiewelle zeigt den Verlauf für die Situation $E < E_0$: Obwohl die Energie E des einlaufenden Teilchens kleiner ist als die Höhe der Potentialstufe E_0 kann die Materiewelle dennoch ein Stück in das klassisch verbotene Gebiet ($x \geq 0$) eindringen.

- Gegeben sei das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{für } x < 0 \\ E_0, & \text{für } x \geq 0 \end{cases} \tag{13}$$

sodass die Schrödingergleichung (3) für die Raumgebiete I ($x < 0$) und II ($x \geq 0$) gegeben ist durch

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \begin{cases} E\psi(x) & \text{Raumgebiet I } (x < 0) \\ (E - E_0)\psi(x) & \text{Raumgebiet II } (x \geq 0) \end{cases} \tag{14}$$

- Raumgebiet I entspricht dem Fall des freien Teilchens, sodass für die Wellenfunktion ψ mit Hilfe von Lösung (7)

$$\psi(x)_I = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx) \tag{15}$$

angesetzt werden kann. A ist dabei die Amplitude der einfallenden und B die Amplitude der reflektierten Welle.

- Die Schrödingergleichung für den Raumbereich II kann mit der Abkürzung $\alpha = \sqrt{2m(E_0 - E}/\hbar$ auch dargestellt werden als

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\alpha^2 \cdot \psi(x) \tag{16}$$

und besitzt daher die Lösung

$$\psi(x)_{II} = C \cdot \exp(i\alpha x) + D \cdot \exp(-i\alpha x) \tag{17}$$

- Damit die so gefundene Gesamtlösung

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I & \text{für } x < 0 \\ \psi_{II} & \text{für } x \geq 0 \end{cases} \tag{18}$$

auch wirklich auf dem gesamten Gebiet $-\infty < x < \infty$ eine Lösung für die Schrödingergleichung ist, müssen die Koeffizienten A, B, C, D so gewählt werden, dass trotz der unstetigen Stellen im Potential E_{pot} die Stetigkeitsbedingung für ψ und $d\psi/dx$ erfüllt bleiben. Das heisst, die Bedingung

$$\psi_I(x = 0) \stackrel{!}{=} \psi_{II}(x = 0) \qquad \rightarrow \quad A + B = C + D \tag{19}$$

und

$$\frac{d}{dx}\psi_I(x = 0) \stackrel{!}{=} \frac{d}{dx}\psi_{II}(x = 0) \qquad \rightarrow \quad ik(A - B) = \alpha(C - D) \tag{20}$$

müssen erfüllt sein.

- Die gefundene Lösung (18) für die Materiewelle $\psi(x)$ hängt entscheidend vom Parameter $\alpha = \sqrt{2m(E_0 - E}/\hbar$ ab. Je nachdem ob die Energie E des einlaufenden Teilchens größer oder kleiner ist als die Potentialstufe E_{pot} ergibt sich für α ein reeller oder komplexer Wert.

- **E < E_0**:

  - Wenn die Energie E des einlaufenden Teilchens kleiner ist als die Höhe des Stufenpotentials E_0 ergibt sich für den Parameter α ein reeller Wert. Mit Hilfe der Normierungsbedingung (12) folgt, dass der Koeffizient C aus (17) Null sein muss.

    Zusammen mit den Bedingungen (19) und (20) ergibt sich für die verbleibenden Koeffizienten

    $$B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} A \qquad \text{und} \qquad D = \frac{2ik}{ik - \alpha} A \tag{21}$$

    Die Wellenfunktionenen im Raumgebiet I ($x < 0$) und im Raumgebiet II ($x \geq 0$) sind somit bestimmt zu

    $$\psi_I(x) = A \left[e^{ikx} + \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} e^{-ikx} \right] \qquad \psi_{II}(x) = D \cdot e^{-ikx} = A \left[\frac{2ik}{ik - \alpha} e^{-ikx} \right] \tag{22}$$

    (vgl. Abb. 1)

  - Durch die Berechnung des Reflektionskoeffizienten im Raumgebiet I

    $$R = \frac{\text{Anteil der reflektierten Teilchen}}{\text{Anteil der einfallenden Teilchen}} = \frac{\left| B \cdot e^{-ikx} \right|^2}{\left| A \cdot e^{ikx} \right|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|ik + \alpha|^2}{|ik - \alpha|^2} = 1 \tag{23}$$

    ist ersichtlich, dass alle Teilchen am Potentialwall reflektiert werden.

  - Berechnet man die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ für ein Teilchen im Raumgebiet II ($x \geq 0$)

    $$\rho(x \geq 0) = |\psi_{II}|^2 = \left| D \cdot e^{-\alpha x} \right|^2 = \frac{4k^2}{\alpha^2 + k^2} |A|^2 \, e^{-2\alpha x} \tag{24}$$

    $$= \frac{4k^2}{k_0^2} |A|^2 \, e^{-2\alpha x} \qquad {\scriptstyle (k_0 = \alpha^2 + k^2 = 2mE_0/\hbar^2)} \tag{25}$$

    so zeigt sich:

    Obwohl die Energien aller einfallenden Teilchen kleiner ist als die Höhe der Potentialstufe kann ein gewisser Anteil $W_{RaumgebietII} = \int_0^\infty |\psi_{II}(x)|^2 dx$ dennoch in das klassisch verbotene Gebiet II eindringen (siehe Abb. 1).

    Dabei ist nach einer Strecke $x = 1/(2\alpha)$ die Eindringwahrscheinlichkeit auf $1/e$ ihres Wertes bei x=0 abgesunken

  - Das bedeutet dass die Teilchen nicht direkt an der Grenzfläche bei $x = 0$ reflektiert werden, sondern erst noch eine gewisse Strecke in das Raumgebiet II eindringen können. Im klassischen Teilchenmodell ist dieses Raumgebiet nicht erreichbar.

- **E > E_0**

  - Wenn die Energie E des einlaufenden Teilchens größer ist als die Höhe des Stufenpotentials E_0 nimmt der Parameter α ausschließlich komplexe Werte an.

    Mit Hilfe des reellen Parameters $k' = \sqrt{2m(E - E_{pot})}/\hbar = i\alpha$ lässt sich die Lösung (17) darstellen als

    $$\psi_{II} = C \, e^{-ik'x} + D \, e^{+ik'x} \tag{26}$$

Da im Raumgebiet II ($x > 0$) keine Teilchen in $-x$-Richtung fliegen, muss $C = 0$ sein und somit $\psi_{II} = D \cdot e^{ik'x}$. Für die verbleibenden Koeffizienten ergibt sich diesmal

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} A \qquad \text{und} \qquad D = \frac{2k}{k + k'} A \tag{27}$$

– Die Wellenfunktionenen im Raumgebiet I ($x < 0$) und im Raumgebiet II ($x \geq 0$) sind somit bestimmt zu

$$\psi_I(x) = A \cdot \left(e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx} \right) \qquad \psi_{II}(x) = A \cdot \left(\frac{2k}{k + k'} e^{ik'x} \right) \tag{28}$$

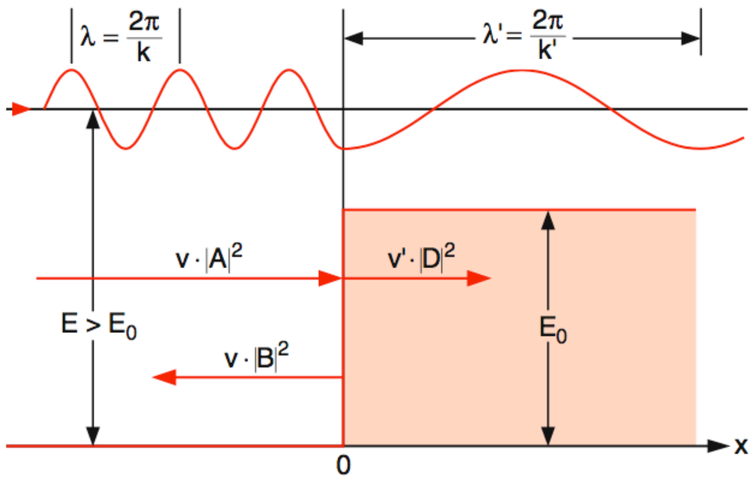

Abbildung 2: Die selbe Potentialstufe wie Abb. 1. In rot ist diesmal der Verlauf der Materiewelle für ein einfallendes Teilchen der Energie E die größer ist als die Höhe E_0 der Potentialstufe. Das Teilchen bewegt sich im Raumgebiet II mit größerer Wellenlänge vorran, was einem geringeren Impuls entspricht

– Der Reflektionskoeffizient R und der Transmissionskoeffizoent T sind nun gegeben durch

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 \qquad T = \frac{v'|D|^2}{v|A|^2} = \frac{4k \cdot k'}{(k + k')^2} \tag{29}$$

und genügen wegen der Erhaltung der Teilchenzahl der Relation $T + R = 1$.

3.2.3 Tunneleffekt

- Wie bei der Potentialstufe gezeigt, können in der wellenmechanischen Beschreibung Objekte in klassisch verbotene Gebiete vordringen. Als Tunneleffekt bezeichnet man die Transmission von Teilchen über eine (klassisch eigentlich zu hohe) Potentialbarriere hinweg.

- Gegeben sei ein ein Potential

$$E_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{für Raumbereich I} \quad (x < 0) \\ E_0 & \text{für Raumbereich II} \quad (0 \leq x \leq a) \\ 0 & \text{für Raumbereich III} \quad (x > a) \end{cases} \tag{30}$$

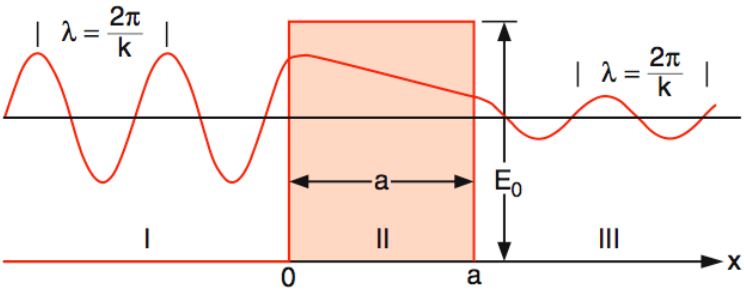

Abbildung 3: Eine von links einfallende Materiewelle der Energie $E < E_0$ trifft auf eine rechteckige Potentialbarriere der Breite a. Bei nicht zu hoher Barrierehöhe E_0 und nicht zu breiter Barrierebreite a kann ein Teil der Materiewelle von Raumgebiet I ins Raumgebiet III *tunneln*, was klassisch nicht möglich wäre.

- Analog zu den Überlegungen bei der Potentialstufe ergeben sich die Ansätze für die Wellenfunktionen der einzelnen Raumbereiche zu

$$\psi_I = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \qquad \psi_{II} = C \cdot e^{i\alpha x} + D \cdot e^{-i\alpha x} \qquad \psi_{III} = A' \cdot e^{ikx} \tag{31}$$

- Die Stetigkeitsbedingung an den Grenzflächen liefert die Randbedingungen

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \qquad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \tag{32}$$
$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0), \qquad \psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a) \tag{33}$$

  mit deren Hilfe sich wie bei der Potentialstufe Relationen zwischen den einzelnen Koeffizienten A, B, C, D, A' herstellen lassen.

- Für den Fall dass die Energie E des von linkes einfallenden Teilchens kleiner ist als die Enegiebariere E_0 ist der Transmissionskoeffizient gegeben durch

$$T = \frac{v \cdot |A'|^2}{v \cdot |A|^2} \tag{34}$$
$$= \frac{1 - E/E_0}{(1 - E/E_0) + (E_0/4E) \cdot sinh^2(\alpha \cdot a)} \tag{35}$$

  mit $\alpha = \sqrt{2m(E_0 - E)}/\hbar$.
  Für große Barrierebreiten ($\alpha \cdot a \gg 1$) lässt sich wegen $sinh(x) = (e^x - e^{-x})/2 \approx \frac{1}{2}e^x$ (für $x \gg 1$) der Transmissionskoeffizient T annähernd angeben als

$$T \approx \frac{16E}{E_0^2}(E_0 - E) \cdot e^{-2\alpha a} \tag{36}$$

  Die Transmission der Materiewelle (und damit der durch sie dargestellten Teilchen) durch die Potentialbarriere hängt also entscheidend ab von der Barrierehöhe E_0, von dessen Breite a und der Differenz $\Delta E = E_0 - E$ zwischen der Barrierehöhe E_0 und der Energie E der einfallenden Welle

3.2.4 Potentialtopf

- Gegeben sei ein Potential $V(x)$ der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \tag{37}$$

Für das Potential im Gebiet $0 \leq x \leq a$ gilt $V(x) = 0$, sodass dort die selbe Schrödingerglei-chung wie fürs freie Teilchen gilt:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \qquad \text{mit } k^2 = 2mE/\hbar^2 \tag{38}$$

deren Lösung angesetzt werden kann zu

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \tag{39}$$

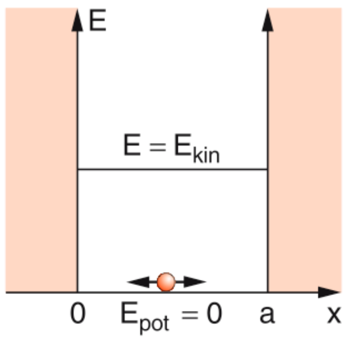

Abbildung 4: Ein quantenmechanisches Teilchen im Potentaltopf mit unendlich hohen Wänden bei $x = 0$ und $x = a$.

- Da die Potentialhöhe in den Bereichen $x \leq 0$ und $x \geq a$ als unendlich angegeben ist, ist die Eindringtiefe in diese verbotenen Gebiete gleich Null, sodass für die Wellenfunktion

  $$\psi(x \leq 0) \equiv \psi(x \geq a) \equiv 0 \tag{40}$$

  gelten muss, d.h. die Randbedingungen.

  $$A + B = 0 \qquad \text{und} \qquad A \cdot e^{ika} + B \cdot e^{-ika} = 0 \tag{41}$$

  erfüllt sein müssen.
  Aus $A + B = 0$ folgt als Lösung für die Wellenfunktion $\psi(x)$ im Raumgebiet $(0 \leq x \leq a)$

  $$\psi(x) = A \cdot (e^{ikx} - e^{-ikx}) = A \cdot 2i\, sin(kx) \tag{42}$$

  Die zweite Randbedingung fordert das verschwinden der Wellenfunktion an der Stelle $x = a$, sodass

  $$A \cdot 2i\, sin(ka) = 0 \qquad \to ka = n\pi \qquad \text{mit } n = 1, 2, 3, ... \tag{43}$$

- Die Lösung der Schrödingergleichung für den Potentialtopf kann somit als

  $$\psi_n(x) = 2i\, A \cdot sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = C \cdot sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad (C = 2i\, A) \tag{44}$$

  angegeben werden. Formal entsprechen die Funktionen $\psi_n(x)$ stehenden Wellen mit den Wellenlängen $\lambda_n = \frac{2a}{n}$ und den Wellenzahlen $k_n = \frac{n \cdot \pi}{a}$ wie von der Schwingung fest eingespannter Saiten bekannt.

- Die entsprechenden zur Welle ψ_n gehörenden Energiewerte E_n können sofort zu

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2 \tag{45}$$

angegeben werden. D.h., die zu verschiedenen *Quantenzahlen n=1,2,3,...* gehörenden Wellenfunktionen ψ_n besitzen gequantelte Energien E_n. Diese steigen proportional zu n^2 an, sind aber umgekehrt proportional zum Quadrat der Potentialbarriere a.
Auffällig ist, dass im Potentialtopf die minimale mögliche Energie oder *Nullpunktsenergie*

$$E_{(n=1)} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2} \tag{46}$$

nicht Null ist. Dies deckt sich mit direkt mit der Heisenbergschen Unschärferelation.

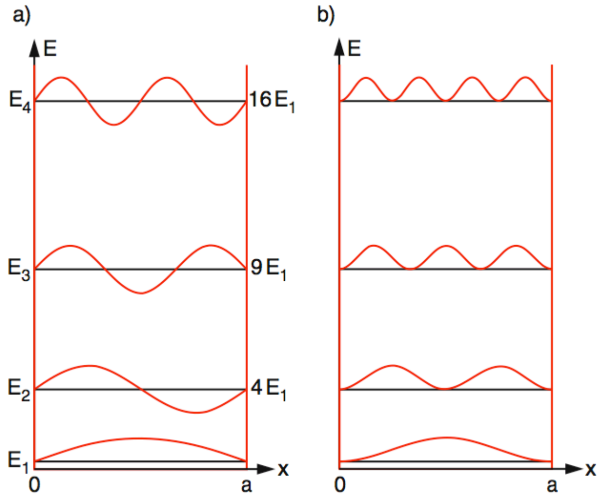

Abbildung 5: (**a**) Wellenfunktionen $\psi(x)$ und (**b**) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ eines Teilchens im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. Für die kleinstmögliche Nullpunktsenergie E_1 gilt: $E_1 \neq 0$.

- Bei einem Potentialtopf mit endlich hohen Wänden E_0 kann die Materiewelle ein Stück in das klassisch verbotenes Gebiet (analog zur Potentialstufe) eindringen:

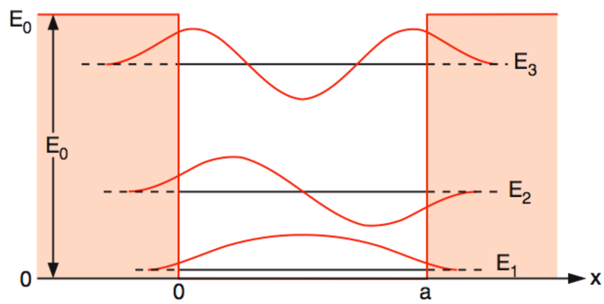

Abbildung 6: Wellenfunktion $\psi(x)$ für verschiedene Energien E_n in einem Potentialtopf mit endlich hohen Wänden E_0. Die Materiewellen können wie bei der Potentialstufe ein Stück in den klassisch verbotenen Bereich eindringen.

3.2.5 Der harmonische Oszillator

- Wir betrachten ein harmonisches Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 \tag{47}$$

sodass auf ein Teilchen stets eine zum Ursprung rücktreibende Kraft $F = -grad(V(x)) = -D \cdot x$ wirkt.

- In der klassischen Physik ist der harmonische Oszillator mit der Bewegung eines Massepunktes m an einer Feder mit der Federkonstante D assoziiert. Als Lösung folgt dort, dass dieser Massepunkt um die Ruhelage harmonische Schwingungen ausführt mit der Frequenz

$$\omega = \sqrt{D/m} \qquad\qquad \rightarrow \ D = \omega^2 \cdot m \tag{48}$$

- Die Schrödingergleichung für den quantenmechanischen Oszillator lautet mit (47) und (48) folglich

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}\omega^2 m x^2 \psi(x) = E\psi(x) \tag{49}$$

Diese kann mit der Variablentransformation $\xi = x \cdot \sqrt{m\omega/\hbar}$ und der Abkürzung $C = 2E/(\hbar\omega)$ in die äquivalente Gleichung

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) + (C - \xi^2)\psi(\xi) = 0 \tag{50}$$

überführt werden. Durch Einsetzen des Lösungsansatzes

$$\psi(\xi) = H(\xi) \cdot e^{-\xi^2/2} \tag{51}$$

in Gleichung (50) folgt als Bestimmungsgleichung für $H(\xi)$ (und damit für $\psi(\xi)$ bzw. $\psi(x)$) des quantenmechanischen Oszillators

$$\frac{d^2}{d\xi^2}H(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}H(\xi) + (C-1)H(\xi) = 0 \tag{52}$$

- Gleichung (52) ist bekannt als **Hermitesche Differentialgleichung** deren Lösungsfunktionen die sogenannten **Hermiteschen Polynome** $\mathbf{H}_\nu(\xi)$ vom Grade ν (mit $\nu = 0, 1, 2, ...$) sind. Nach konsequenter Rechnung kann die gesuchte Wellenfunktion als

$$\psi(x) = \tilde{H}(x) \cdot e^{-(mE/\hbar^2)x^2/2} \tag{53}$$

angegeben werden, wobei $\tilde{H}(x)$ die durch die Rücktransformation von $H(\xi) \rightarrow \tilde{H}(x)$ (invers zur oben erwähnten Variablentransformation) gewonnen hermiteschen Polynome darstellt.

- Durch Einsetzen der Wellengleichung (53) in (49) erhält man für die Energiewerte

$$E(\nu) = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar\omega, \qquad\qquad \nu = 0, 1, 2, ... \tag{54}$$

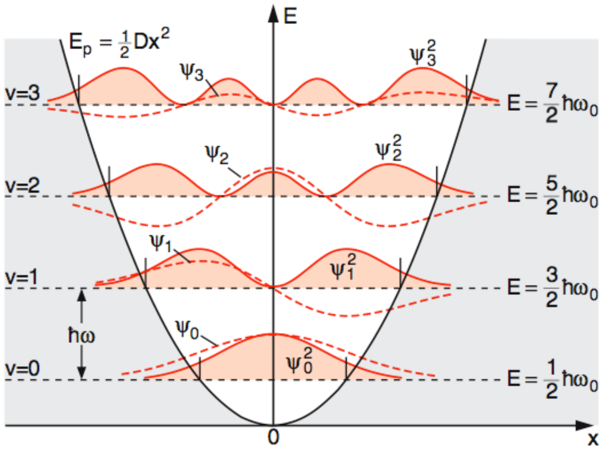

Abbildung 7: Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ und deren Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten $\rho(x) = |\psi_n|^2$ für verschiedene Schwingungszustände v im harmonischen Oszillator. Die verschiedenen Energieniveaus E haben im Gegensatz zum Potentialtopf äquidistante Abstände. Die Nullpunktsenergie ist auch hier in Übereinstimmung mit der Heisenberg'schen Unschärferelation ungleich Null.

mit den Quantenzahlen ν.
Die Energiewerte des harmonischen Oszillators liegen äquidistant und haben den Abstand $\hbar\omega$. Der zur Quantenzahl $\nu = 0$ gehörende tiefstmögliche Energiezustand E_0 hat die Energie

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0 \tag{55}$$

Da durch die ganze Zahl ν die Schwinungsenegie $E = (\nu + 1/2)\hbar\omega$ eindeutig festgelegt ist, heißt ν Schwingungsquantenzahl.

Beispielaufgabe

Wie groß ist die Reflexionswahrscheinlichkeit R für ein Teilchen mit $m = 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ kg und $E_{kin} = 0{,}4$ meV, das auf eine rechteckige Potentialbarriere der Höhe $E_{pot} = 0{,}5$ meV und der Breite $\Delta x = 1$ nm trifft?

Lösung:

Die Reflexionswahrscheinlichkeit $R = 1 - T$ kann berechnet werden. Dabei ist

$$\frac{E}{E_0} = \frac{0{,}4}{0{,}5} = 0{,}8\,,$$

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{\sqrt{2m(E_0 - E)}}{\hbar}\\ &= \frac{\sqrt{2 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27} \cdot 0{,}1 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-22}}}{1{,}05 \cdot 10^{-34}}\,\mathrm{m}^{-1}\\ &= 2{,}20 \cdot 10^{9}\,\mathrm{m}^{-1}\end{aligned}$$

$$a = 10^{-9}\,\mathrm{m} \;\Rightarrow\; \alpha \cdot a = 2{,}20$$

$$\Rightarrow T = \frac{0{,}2}{0{,}2 + 0{,}3125 \cdot \sinh^2 2{,}20} = 0{,}030\,,$$

d. h. 3% aller Teilchen werden transmittiert, 97% reflektiert.