1. Wellenmechanik

1.1. Klassische Physik

1.1.1. (Hamiltonsche) Mechanik

- Der Zustand eines Punktteilchens wird durch die Angabe von Ort $\vec{x}$ und Impuls $\vec{p}$, das heißt durch einen Punkt im Phasenraum beschrieben
- Seine Dynamik ist durch die Hamiltonfunktion $H(\vec{x}, \vec{p})$ und die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen
$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$
festgelegt.
Zum Beispiel für ein Teilchen der Masse m in einem zeitabhängigen Potential $V(\vec{x})$ ist die Hamiltonfunktion die Gesamtenergie
$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$
und die Bewegungsgleichungen
$$\dot{x}_i = \frac{\dot{p}_i}{m} = v_i \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i$$
- Lösen der Bewegungsgleichungen unter Anfangsbedingungen $(\vec{x}_0, \vec{p}_0)$ zum Zeitpunkt t_0 ergibt die Trajektorie $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ des Teilchens. Die Trajektorie legt die Zustände des Teilchens zu beliebigen anderen Zeitpunkten fest.
- Die Messung einer physikalischen Messgröße $M(\vec{x}, \vec{p})$ zum Zeitpunkt t liefert wie erwartet das Ergebnis $M(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$. Zum Beispiel Energie $H(\vec{x}, \vec{p})$, Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

Alle diese Punkte müssen in der Quantenmechanik revidiert werden.

1.1.2. Klassische Elektrodynamik

- Elektromagnetische Felder werden durch Angabe des elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$ und magnetischen Feldes $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x})$ beschrieben.
- Deren Dynamik ist durch die Maxwellgleichungen festgelegt. In Abwesenheit von Ladung und

Strömen, erfüllen die Felder die Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \triangle\right)\mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right) = 0$$

mit der fundamentalen Lösung

$$\mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\vec{k}\vec{x}-\omega t\right)}$$

wobei $\mathcal{E}$ eine beliebige Komponente von $\vec{\mathcal{E}}\left(\vec{x}\right)$ darstellt und A die Amplitude der Welle bezeichnet. Die physikalische Lösung ist $\Re\left(\mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right)\right) = \frac{1}{2}\left(\mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right) + \mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right)^*\right)$.

- Die Dispersionsrelation das heißt der Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$ und Wellenvektor $\vec{k}$ beziehungsweise Wellenzahl $k = \left|\vec{k}\right|$, lautet für elektromagnetische Wellen (im Vakuum)

$$\vec{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad \text{beziehungsweise} \quad k = \left|\vec{k}\right| = \frac{\omega}{c}$$

- Die Wellengleichung ist linear, also gilt das Superpositionsprinzip: Jede Linearkombination von Lösungen ist wieder eine Lösung. Die Allgemeine Lösung ist eine Superposition

$$\mathcal{E}\left(\vec{x}, t\right) = \int \mathrm{d}^3k A\left(\vec{k}\right)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\vec{k}\vec{x}-\omega t\right)}$$

wobei $A\left(\vec{k}\right)$ die Amplitude für Komponente mit Wellenvektor $\vec{k}$ ist.

- Die Energie im elektromagnetischen Feld ist

$$\begin{aligned} E &= \int \mathrm{d}^3x \frac{\epsilon_0}{2}\left(\mathcal{E}^2\left(\vec{x}, t\right) + c^2\mathcal{B}^2\left(\vec{x}, t\right)\right) \\ &= \int \mathrm{d}^3x \epsilon_0 \mathcal{E}^2\left(\vec{x}, t\right) \end{aligned}$$

(wegen $|\mathcal{E}| = c\,|\mathcal{B}|$) und der Energiefluss (Poynting-Vektor)

$$\vec{S} = \mu_0 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$$

beziehungsweise für skalare Felder

$$\left|\vec{S}\right| = c\epsilon_0\mathcal{E}^2\left(\vec{x}, t\right)$$

Gemessen wird (in der Regel) die Intensität. Das ist der zeitlich über eine Periode $T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{\nu}$

gemittelte Energiefluss

$$
\begin{aligned}
I(\vec{x}, t) &= c\epsilon_0 \frac{1}{T} \int\limits_{t}^{t+T} \mathrm{d}t' \mathcal{E}^2(\vec{x}, t) \\
&= c\epsilon_0 \left|\mathcal{E}(\vec{x}, t)\right|^2
\end{aligned}
$$

- Der Nachweis der Wellennatur des elektromagnetischen Feldes im Youngschen Doppelspaltexperiment (Abb. Inspiriert aus Schwabl, Quantenmechanik)

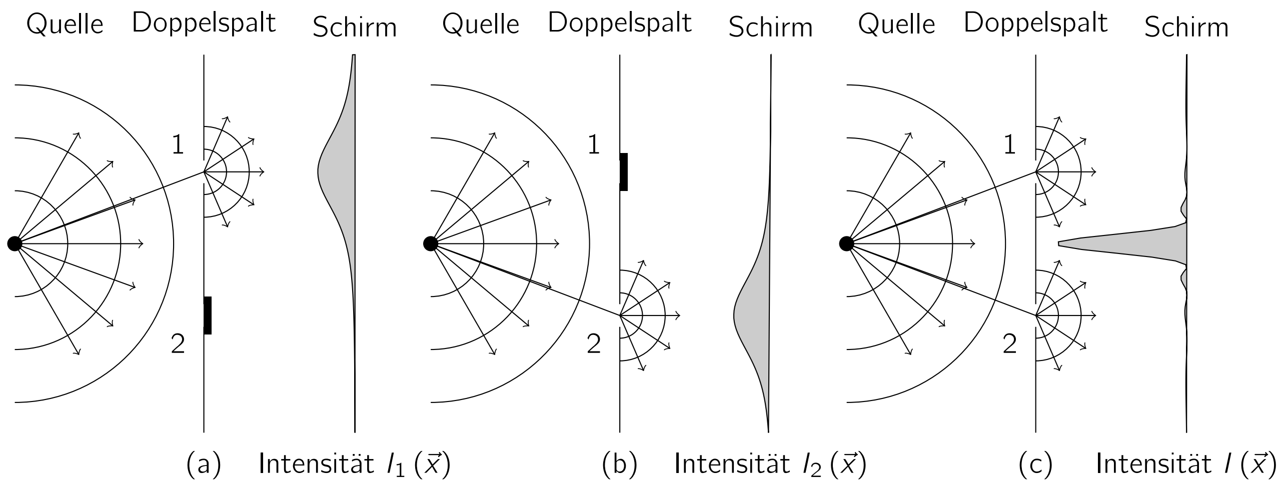


Abbildung 1: Beugung am Doppelspalt (a) mit Spalt 1 geöffnet, (b) mit Spalt 2 geöffnet, (c) beide Spalte geöffnet

$$
\begin{aligned}
I &\sim |E|^2 \\
&\sim |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\Re\left(E_1 E_2^*\right)
\end{aligned}
$$

1.1.3. Zusammenfassung

Mechanik	Elektrodynamik
Teilchen	Wellen
Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$	Felder $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x}, t)$, $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x}, t)$
Hamiltonsche (Newtonsche) Bewegungsgleichungen	Maxwellgleichungen

Die Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ der Teilchen gehen als Ladungs- und Stromdichten in die inhomogenen Maxwellgleichungen ein; Die Lösungen $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x},t)$, $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x},t)$ der Maxwellgleichungen gehen über die Lorentzkraft in die Bewegungsgleichungen der Teilchen ein.

1.2. Empirische Grundlagen der Quantenmechanik

1.2.1. Wellen haben Teilchencharakter

- Erste Quantenhypothese durch Max Planck (1900) zur Erklärung des Spektrums der Schwarzkörperstrahlung: die Energie einer Welle der (Kreis-)Frequenz $\omega = 2\pi\nu$ ist ein ganzzahliges Vielfaches eines elementaren Energiequantums

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

  Das Plancksche Wirkungsquantum h hat die Einheit einer Wirkung = Energie × Zeit, $[h]$ = **Js**. Aus Plancks Quantenhypothese ergibt sich das Plancksche Strahlungsgesetz. Es beschreibt das empirisch bekannte Spektrum thermischer Strahlung, wenn

$$h = 6.62 \cdot 10^{-34}\mathbf{Js} \quad \hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}\mathbf{Js}$$

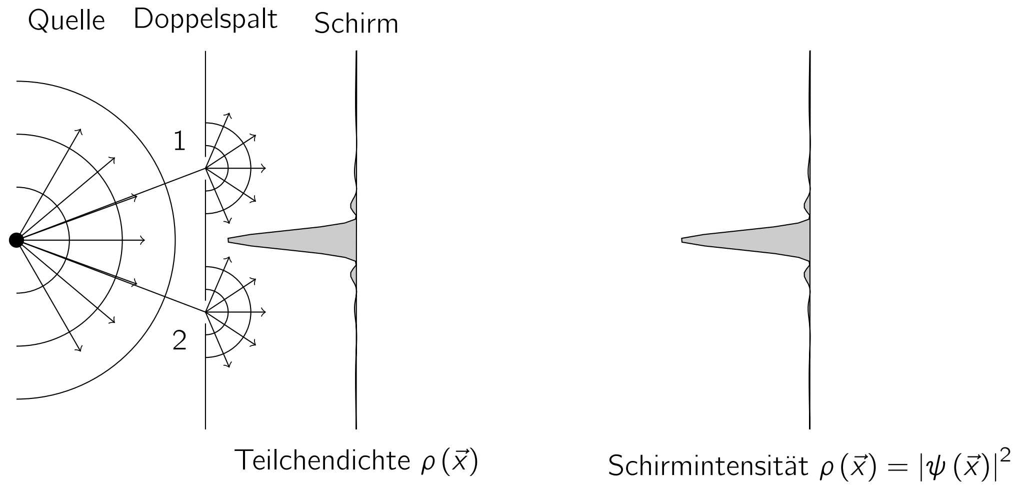
  gewählt wird.

- Albert Einsteins Erklärung für den photoelektrischen Effekt (1905): Licht der Frequenz ω besteht aus Teilchen der Energie $E = \hbar\omega$ und die Lichtteilchen (Photonen) haben einen Impuls

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (\vec{k} \text{ Wellenvektor})$$

- Comptoneffekt (1924, Vergrößerung der Wellenlänge des Lichts bei Streuung an Elektronen) kann mit $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ als elastischer Stoß zweier Teilchen erklärt werden.

- Doppelspaltexperiment mit Einzelphotonauflösung (Abb. nach Schwabl, Quantenmechanik)



1.2.2. Teilchen haben Wellencharakter

- Bohrsches Atommodell (1913)

  1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen. Sie strahlen dabei keine elektromagnetische Energie ab.
  2. Erlaubt sind nur Kreisbahnen mit Drehimpuls

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3$$

  3. Elektromagnetische Energie wird nur bei einem Übergang zwischen zwei Kreisbahnen abgestrahlt.

  Konsequenzen aus den Bohrschen Postulaten:

- Mit dem Virialsatz

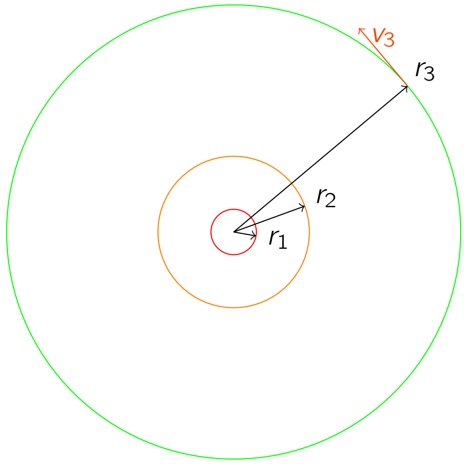
$$E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}E_{\text{pot}} \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

folgt aus der Forderung $L = mrv = n\hbar$ die Geschwindigkeit und der Radius für die n-te Kreisbahn

$$v_n = \alpha c\frac{1}{n} \quad r_n = a_0 n^2$$

mit der Feinstrukturkonstanten α und dem Bohrradius a_0

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha mc} \simeq 0.5 \cdot 10^{-10}\mathbf{m}$$



- Die Energie der n-ten Kreisbahn ist

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{m\alpha^2 c^2}{n^2}$$

Bei einem Übergang von der n-ten zur m-ten Kreisbahn wird Strahlung emittiert mit einer Frequenz

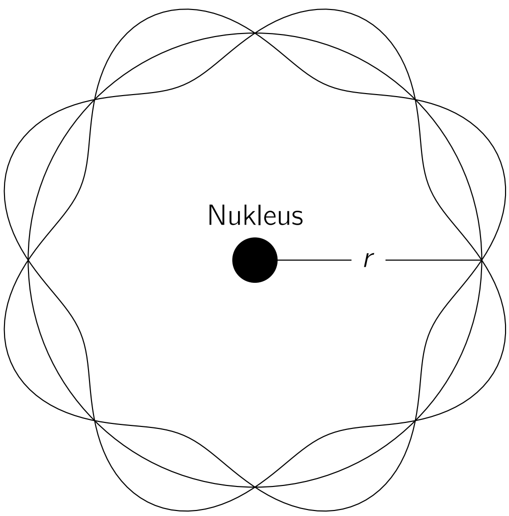
$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Wobei $R = \dfrac{m\alpha^2 c^2}{2h}$ die Rydbergkonstante ist.

- Luis de Broglie(1924): Die Bewegung eines massiven Teilchens mit Impuls p entspricht einer „Materiewelle“ mit einer de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Damit entsprechen die Bohrschen Kreisbahnen stehenden Wellen der Materiewelle



$$\lambda_n = \frac{h}{mv_n} = 2\pi a_0 n \quad \rightarrow \quad n\lambda_n = 2\pi a_0 n^2 = 2\pi r_n$$

- Direkter Nachweis der Wellennatur geschieht in Interferenzexperimenten:

  Davisson und Germer (1927): Elektron an Kristallgittern

  Jönssen (1954): Doppelspaltexperiment mit Elektronen

  Inerferometrie mit organischen Molekülen

1.3. Die Wellenfunktion

[Es folgt eine provisorische und vereinfachte Darstellung der Postulate der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Die exakte und vollständige Darstellung folgt später in Kapitel 2.]

- Die Erfahrung zeigt:
  - Der Zustand eines Teilchens wird durch eine (komplexe) Wellenfunktion

    $$\psi\left(\vec{x}, t\right)$$

    beschrieben.
  - Seine Dynamik (zeitliche Entwicklung, Evolution) ist durch die Schrödingergleichung festgelegt

    $$\boxed{\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi\left(\vec{x}, t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \psi\left(\vec{x}, t\right) + V\left(\vec{x}, t\right) \psi\left(\vec{x}, t\right)}$$

    Die Lösung der Schrödingergleichung unter einer Anfangsbedingung $\psi\left(\vec{x}, 0\right)$ ergibt die zeitlich entwickelte Wellenfunktion $\psi\left(\vec{x}, t\right)$.
  - Die Wellenfunktion $\psi\left(\vec{x}, t\right)$ legt die Statistik der Resultate von Messungen physikalischer Messgrößen $A\left(\vec{x}, \vec{p}\right)$ zum Zeitpunkt t fest:

    Für die Messung der Position des Teilchens gilt (Bornsche Regel): Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Volumen d^3x vorzufinden,ist

    $$P\left(\vec{x}, \vec{p}\right) = \left|\psi\left(\vec{x}, t\right)\right|^2 \, \mathrm{d}^3x$$

    Das heißt, die Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum ist

    $$\rho\left(\vec{x}, t\right) = \left|\psi\left(\vec{x}, t\right)\right|^2 \qquad \left(\left[\rho\left(\vec{x}, t\right)\right] = \mathbf{m}^{-3}\right)$$

- Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum vorzufinden, muss 1 sein:

$$1 = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x \, |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

Wir fordern daher, dass eine als Wellenfunktion in Frage kommende Funktion $\psi(\vec{x}, t)$

  - quadratintegrabel und
  - auf 1 normiert ist.

Eine Wellenfunktion (für den Bewegungszustand eines Teilchens) ist damit Element des Hilbertraumes $L^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegrablen Funktionen,

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \middle| \int d^3x \, |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}$$

- Die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen ($V(\vec{x}, t) \equiv 0$)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \psi(\vec{x}, t)$$

wird durch ebene Wellen gelöst

$$\psi(\vec{x}, t) = c \, e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

mit $c \in \mathbb{C}$ und der Dispersionsrelation

$$\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$$

Mit $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (beziehungsweise $p = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$) ist das äquivalent zu $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Eine ebene Materiewelle mit Wellenvektor $\vec{k}$ beschreibt die Bewegung eines freien Teilchens mit Energie

$$E = \frac{\left(\hbar\vec{k}\right)^2}{2m}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer ebenen Welle ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = |c|^2 \equiv \text{konstant}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist also gleichmäßig im ganzen Raum. Ebene Wellen sind nicht normierbar (nicht Element von $L^2(\mathbb{R}^3)$)! Sie sind keine physikalischen Zustände.

Durch Superposition von ebenen Wellen können normierbare, physikalische Zustände aufgebaut werden, sogenannte Wellenpakete:

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \mathrm{d}^3k\, c\left(\vec{k}\right)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left[\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega\left(\vec{k}\right)t\right]}$$

löst die Schrödingergleichung, wenn $\omega\left(\vec{k}\right) = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}$ für beliebige Amplituden $c\left(\vec{k}\right)$.

Normierung erfordert

$$1 = \int \mathrm{d}^3x\, |\psi(\vec{x},t)|^2 = \int \mathrm{d}^3k \left|c\left(\vec{k}\right)\right|^2$$

Das heißt, es muss $c\left(\vec{k}\right)$ selbst quadratintegrabel und normiert sein.

- Die lösung der Schrödingergleichung für eine vorgegebene Anfangsbedingung $\psi(\vec{x},0)$ zum Zeitpunkt $t=0$ erhält man aus der Bedingung

$$\psi(\vec{x},0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \mathrm{d}^3k\, c\left(\vec{k}\right)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

Also ist $\psi(\vec{x},0)$ die Fouriertransformierte von $c\left(\vec{k}\right)$. Die inverse Transformation ergibt

$$c\left(\vec{k}\right) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \mathrm{d}^3x\, \psi(\vec{x},0)\, e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

Einsetzen der aus der Anfangsbedingung $\psi(\vec{x},0)$ bestimmten Amplituden in die Allgemeine Lösung ergibt die Wellenfunktion zu Zeiten t

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \mathrm{d}^3k\, c\left(\vec{k}\right)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left[\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t\right]}$$

1.4. Die Impulswellenfunktion

- Die Koeffizienten $c\left(\vec{k}\right)$ sind die Amplituden der ebenen Wellen $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}$ (mit festem Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$) im Wellenpaket $\psi(\vec{x})$.

  Wir erwarten, dass $\left|c\left(\vec{k}\right)\right|^2$ die Wahrscheinlichkeit festlegt, bei einer Messung des Impulses $\vec{p}$ an einem Teilchen im Zustand $\psi(\vec{x})$ den Wert $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ zu finden.

- Allgemein definieren wir die Impulswellenfunktion $\varphi(\vec{p},t)$ bei gegebener (Raum)-Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$

$$\varphi(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \mathrm{d}^3x\, \psi(\vec{x},t)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$$

(Damit gilt $\varphi(\vec{p},0) = \hbar^{-\frac{3}{2}} c\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)$.)

Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Impulses einen Wert $\vec{p}$ zu finden ist

$$P(\vec{p}, t) = |\varphi(\vec{p})|^2 \, \mathrm{d}^3 p$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum ist

$$|\varphi(\vec{p})|^2$$

Es gilt

$$\int \mathrm{d}^3 p \, |\varphi(\vec{p})|^2 = 1$$

1.5. Wellenmechanik in einer Dimension

- Wir betrachten im Folgenden die Bewegung eines Teilchens in einer Dimension. Sein Zustand wird beschrieben durch eine Wellenfunktion $\varphi(x, t)$ in

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \middle| \int \mathrm{d}x \, |\varphi(x)|^2 < \infty \right\}$$

- Ein Teilchen mit Energie $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ wird beschrieben durch eine ebene Welle

$$\varphi(x, t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx - \omega t)}$$

- Ein Wellenpaket in einer Dimension ist

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, c(k) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx - \omega t)}$$

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ und $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, |c(k)|^2 = 1$. Die zugehörige Impulswellenfunktion ist

$$\psi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \varphi(x, t) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{x}{\hbar}}$$

Insbesondere für $t = 0$ ist $\psi(p, 0) = \frac{1}{\hbar} c\left(\frac{p}{\hbar}\right)$

- Beispiel: Gaußsches Wellenpaket

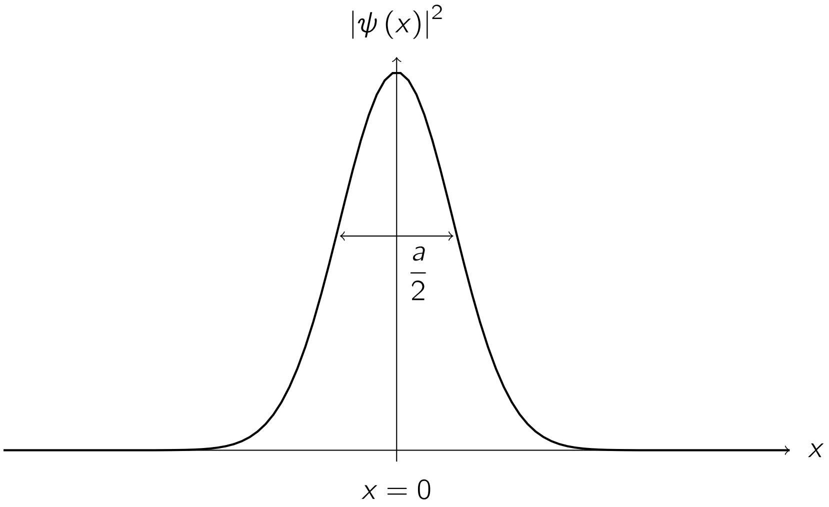
$$\varphi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x - \frac{x^2}{a^2}}$$

mit $k_0, a \in \mathbb{R}$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ort ist

$$\rho(x,0) = |\varphi(x,0)|^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-2\frac{x^2}{a^2}}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}x \rho(x) &= 1 \\ \langle x \rangle &= \int \mathrm{d}x x \rho(x) = 0 \\ \left\langle x^2 \right\rangle &= \int \mathrm{d}x x^2 \rho(x) = \frac{a^2}{4} \\ \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2} \end{aligned}$$



- Die Amplituden $c(k)$ sind

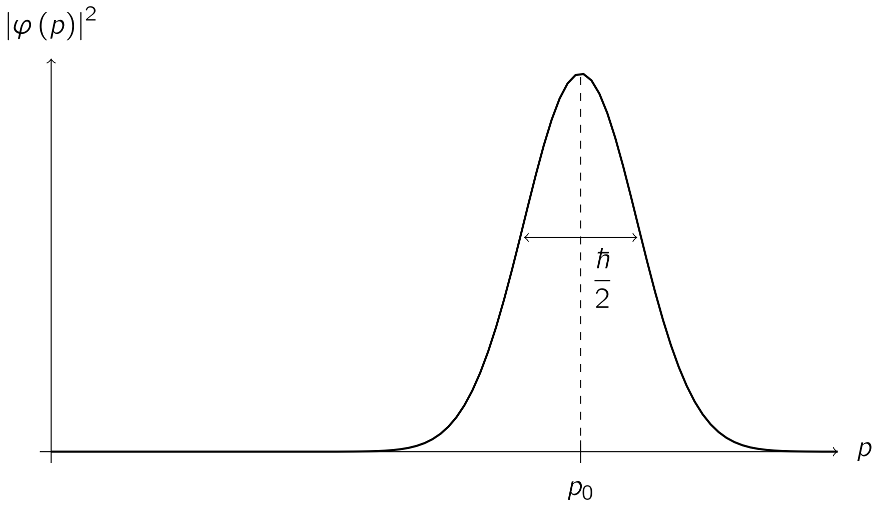
$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \varphi(x,0)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \\ &= \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2 \frac{a^2}{4}} \end{aligned}$$

- Die Impulswellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ ist

$$\psi(p,0) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-(p-p_0)^2 \frac{a^2}{4\hbar^2}}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}p \, |\psi(p,0)|^2 &= 1 \\ \langle p \rangle = \int \mathrm{d}p p \, |\psi(p,0)|^2 &= p_0 = \hbar k_0 \\ \left\langle p^2 \right\rangle = \int \mathrm{d}p p^2 \, |\psi(p,0)|^2 &= p_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2} \\ \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} &= \frac{\hbar}{a} \end{aligned}$$



Das heißt, dass die Unschärfen in Ort und Impuls nicht unabhängig sind

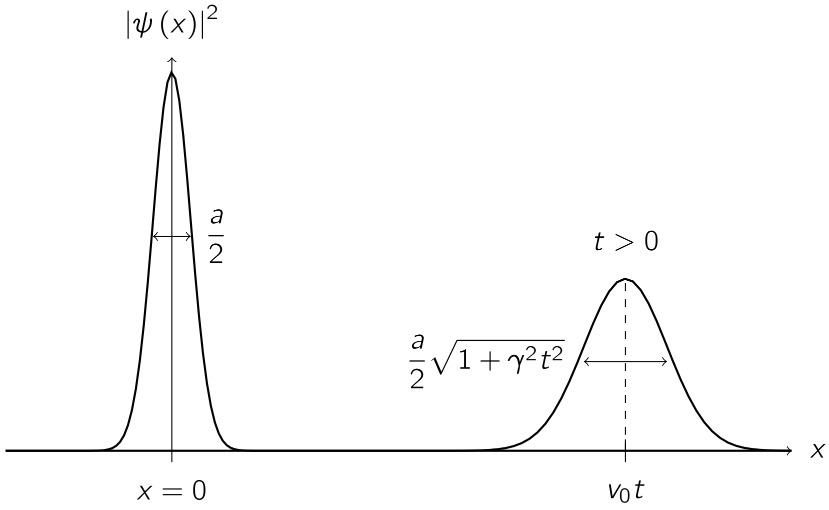
$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

- Das zeitlich entwickelte Wellenpaket

$$\psi(x,t) = \frac{11}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k c(k) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0 x - \phi)}}{\left(1+\gamma^2 t^2\right)^{1/4}} \mathrm{e}^{-\frac{x - v_0 t}{a^2(1+\mathrm{i}\gamma t)}}$$

wobei

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} \quad \gamma = \frac{2\hbar}{m a^2} \quad \varphi = \theta + \frac{k_0 v_0 t}{2} \quad \tan(2\theta) = \gamma t$$



Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist

$$\begin{aligned}\rho(x,t) &= |\psi(x,t)|^2 \\ &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1+\gamma^2 t^2)^{1/2}}\, \mathrm{e}^{-\frac{2(x-x_0)^2}{a^2(1+\gamma^2 t^2)}}\end{aligned}$$

mit dem Mittelwert

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_t &= v_0 t \\ \Delta x_t &= \frac{a}{2}\sqrt{1+\gamma^2 t^2}\end{aligned}$$

- Es gibt keine Änderungen des Impulses beziehungsweise der Statistik von Impulsmessungen für ein freies Teilchen und

$$|\varphi(p,t)|^2 = |\varphi(p,0)|^2$$

1.6. Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

- In der Elektrodynamik gilt für die Ladungsdichte $\rho_q(\vec{x},t)$ und die Stromdichte $\vec{j}_q(\vec{x},t)$ der Erhaltungssatz ($\rightarrow$ Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_q(\vec{x},t) + \nabla \cdot \vec{j}_q(\vec{x},t) = 0$$

Die Gesamtladung ist erhalten

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_V \mathrm{d}^3x\rho_q(\vec{x},t) &= -\int_V \mathrm{d}^3x \bigtriangledown\cdot\vec{j}_q(\vec{x},t)\\ &= -\int_{\partial V}\mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_q(\vec{x},t)\\ &= 0,\text{ für } V\to\infty \text{ wegen } \lim_{x\to\infty}\vec{j}_q(\vec{x},t)=0\end{aligned}$$

- In der Quantenmechanik gilt ein entsprechender Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit. Wir betrachten die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) = \frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{x},t)|^2 &= \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t)\\ &= \psi(\vec{x},t)\,\dot{\psi}^*(\vec{x},t)+\psi^*(\vec{x},t)\,\dot{\psi}(\vec{x},t)\end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\bigtriangleup\psi + V\psi$$

impliziert

$$-\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\bigtriangleup\psi^* + V\psi^*$$

Damit ergibt sich

$$\psi^*\dot{\psi}+\psi\dot{\psi}^* = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\bigtriangleup\psi + V\psi^*\psi\right) - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\bigtriangleup\psi^* + V\psi^*\psi\right)$$

Also

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) + \frac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}}\left(\psi^*\bigtriangleup\psi - \psi\bigtriangleup\psi^*\right) = 0$$

Wir definieren den Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{j}(\vec{x},t) &= \frac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}}\left(\psi^*(\vec{x},t)\bigtriangledown\psi(\vec{x},t) - \psi(\vec{x},t)\bigtriangledown\psi^*(\vec{x},t)\right)\\ &= \frac{1}{m}\Re\left[\psi^*(\vec{x},t)\,(-\mathrm{i}\hbar\bigtriangledown)\,\psi(\vec{x},t)\right]\end{aligned}}$$

so, dass

$$\bigtriangledown\cdot\vec{j} = \frac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}}\left(\bigtriangledown\psi^*\cdot\bigtriangledown\psi + \psi^*\bigtriangleup\psi - \bigtriangledown\psi\cdot\bigtriangledown\psi^* - \psi\bigtriangleup\psi^*\right)$$

Damit gilt der Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) + \bigtriangledown\cdot\vec{j} = 0}$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit $\int d^3x\rho(\vec{x},t) = 1$ ist erhalten (Beweis wie in der Elektrodynamik; $\lim\limits_{x\to\infty} \vec{j}(\vec{x},t) = 0$ weil $\lim\limits_{x\to\infty} \psi(\vec{x},t) = 0$)

- Beispiel: Der Wahrscheinlichkeitsstrom für eine ebene Welle $\psi(\vec{x},t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\vec{k}\vec{x}-\omega t\right)}$ ist

$$\begin{aligned}
\vec{j}(\vec{x},t) &= \frac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}}\left(\psi^*\left(\mathrm{i}\vec{k}\right)\psi - \psi\left(-\mathrm{i}\vec{k}\right)\psi^*\right) \\
&= \frac{2\,\mathrm{i}\hbar\vec{k}}{2m\,\mathrm{i}}\psi^*\psi \\
&= \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}
\end{aligned}$$

- Beispiel: Superpostition zweier ebener Wellen in 1D

$$\psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} + B\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-kx-\omega t)}$$

der Strom ist

$$\vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)\vec{e}_x$$

1.7. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

- Falls das Potential $V(\vec{x})$ nicht explizit von der Zeit abhängt, so ist die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\vec{x})\right)\Psi(\vec{x},t) \\
&= H(\vec{x})\,\Psi(\vec{x},t)
\end{aligned}$$

$H(\vec{x})$ wird als Hamiltonoperator des Systems bezeichnet.

- Separation der Variablen: Wir suchen Lösungen der Art

$$\Psi(\vec{x},t) = \chi(t)\,\psi(\vec{x})$$

Damit folgt:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\chi}(t)\,\psi(\vec{x}) = \chi(t)\,H(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) \quad \to \quad \mathrm{i}\frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{H(\vec{x})\,\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} \equiv E$$

mit einer Separationskonstanten E (der Dimension Energie). Also fordern wir

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = E \tag{1}$$

$$\frac{H\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} = E \tag{2}$$

- (1) äquivalent zu

$$\dot{\chi}(t) = -\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}\chi(t) \quad \rightarrow \quad \chi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}\chi(0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}$$

- (2) ergibt die <u>zeitunabhängige Schrödingergleichung</u>

$$\boxed{\begin{aligned} H(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) &= E\psi(\vec{x}) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}) &= E\psi(\vec{x}) \end{aligned}}$$

Dies ist eine <u>Eigenwertgleichung</u>:

– $\psi(\vec{x})$ ist eine <u>Eigenfunktion</u> (<u>Energieeigenzustand</u> oder <u>stationärer Zustand</u>) des Hamiltonoperators H.

– E ist der zur Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ gehörende <u>Eigenwert</u> (<u>Energieeigenwert</u>).

Für eine gegebene Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ mit Eigenwert E ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}$$

- Im Allgemeinen besitzt ein Hamiltonoperator mehrere (unendlich viele) Eigenfunktionen und Eigenwerte

$$H\psi_{n,\alpha}(\vec{x}) = E_n\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

n legt die Eigenwerte E_n fest (n, α) legen die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ fest. α ist ein Entartungsindex, der verschidene Eigenzustände zum selben Eigenwert unterscheidet. Die Indizes (n, α) können diskret und / oder kontinuierlich verteilt sein. Die Menge der Energieeigenwerte $\{E_n\}$ ist das <u>Spektrum</u> des Hamiltonoperators. Das Spektrum kann entsprechend diskret und / oder kontinuierlich sein. [Wir werden alle diese Fälle in Beispielen kennenlernen.]

- Die zeitunabhängige Lösung für jede Eigenfunktion ist

$$\Psi(\vec{x}, t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n t}{\hbar}}\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung ist eine Superposition der einzelnen Lösungen

$$\Psi(\vec{x},t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} \Psi_{n,\alpha}(\vec{x},t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_{n,\alpha}$$

Die $c_{n,\alpha}$ sind die Amplituden für die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ und ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x},0)$ [siehe später].

- Beispiel: Freies Teilchen: Es gilt also $V(\vec{x}) \equiv 0$ also ist der Hamiltonoperator $H(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$ und die zuitunabhängige Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Eigenzustände des Hamiltonoperators sind ebene Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

mit zugehörigem Eigenwert

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$$

Der Wellenvektor $\vec{k} \in \mathbb{R}$ legt die Eigenzustände und -werte fest.

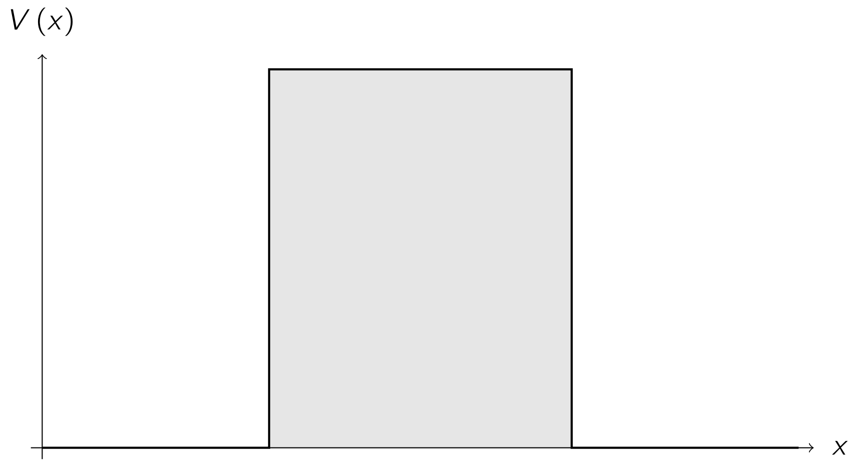
Die allgemeine Lösung lautet

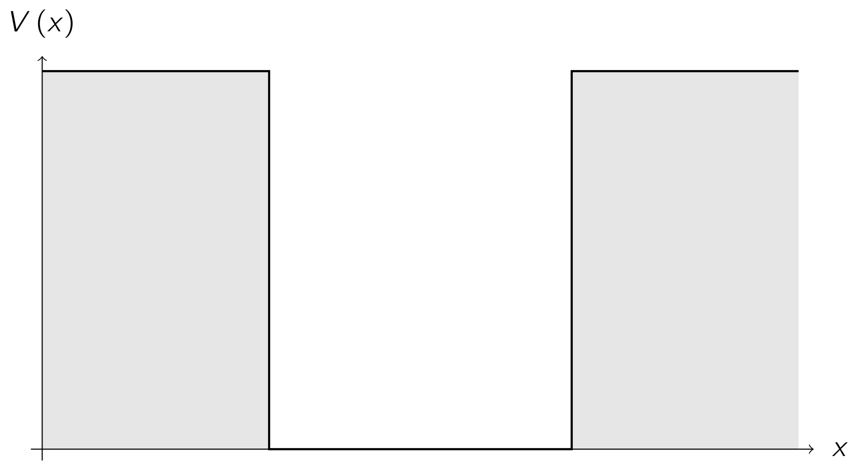
$$\Psi(\vec{x},t) = \int \mathrm{d}^3k\, c\left(\vec{k}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t\right)} \quad \text{mit } \omega = \frac{E_{\vec{k}}}{\hbar}$$

Ist also ein Wellenpaket. Die Amplituden $c\left(\vec{k}\right)$ ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x},0)$.

1.8. Wellenmechanik in einer Dimension mit Potential

- Die Schrödingergleichung soll für stückweise konstantes, zeitunabhägiges Potential $V(\vec{x})$ gelöst werden, also zum Beispiel.

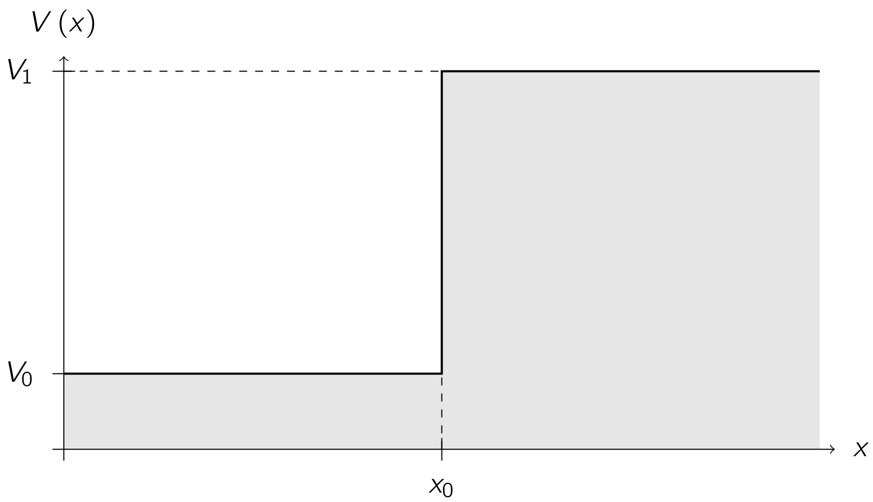




Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

Wie verhält sich $\psi(\vec{x})$ an den Sprungstellen von $V(x)$? Sei x_0 eine der Sprungstellen



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

Integrieren im Intervall $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ ergibt

$$\begin{aligned}
\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \mathrm{d}x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \mathrm{d}x\,(V(x) - E)\psi(x) \\
\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0+\epsilon) - \frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0-\epsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2}\left[\int_{x_0-\epsilon}^{x_0} \mathrm{d}x\,(V_0 - E)\psi(x) + \int_{x_0}^{x_0+\epsilon} \mathrm{d}x\,(V_1 - E)\psi(x)\right] \\
&= \frac{2m}{\hbar^2}\left[(V_0 - E)\int_{x_0-\epsilon}^{x_0} \mathrm{d}x\psi(x) + (V_1 - E)\int_{x_0}^{x_0+\epsilon} \mathrm{d}x\psi(x)\right]
\end{aligned}$$

Im Limes $\epsilon \to 0$ ist:

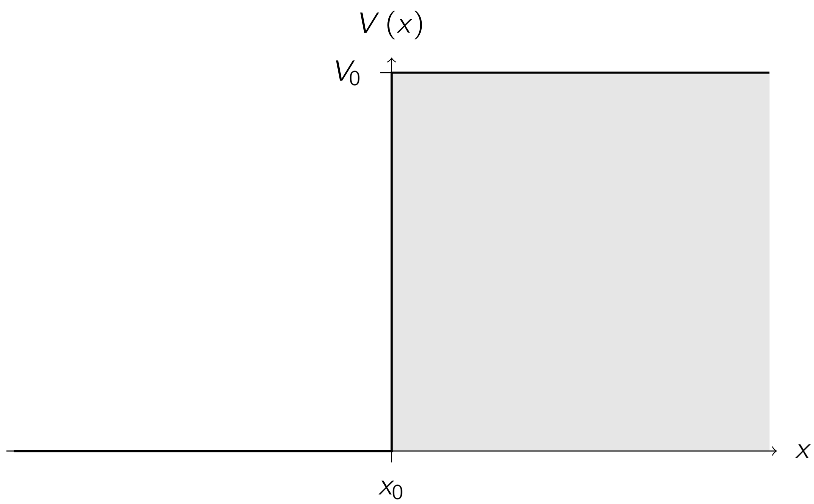
$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0+\epsilon) - \frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0-\epsilon) \to 0$$

Die Ableitung des Wellenfunktion an der Sprungstelle des Potentials ist stetig. Damit ist auch die Wellenfunktion selbst an der Sprungstelle stetig. An Sprungstellen x_0 von $V(x)$ gilt:

$$\boxed{\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0+\epsilon) &= \lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0-\epsilon) \\ \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0+\epsilon) &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\partial}{\partial x}(x_0-\epsilon)\end{aligned}}$$

1.8.1. Potentialstufe

- Gegeben sei ein Potential der Form



$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x \leq 0 \\ V_0 & : \quad x > 0 \end{cases}$$

Wir suchen die Eigenfunktionen und Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

das heißt in den Bereichen (3) und (4) gilt:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)\,\textbf{??} \tag{3}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\psi(x)\,\textbf{??} \tag{4}$$

- <u>1. Fall:</u> Das Teilchen habe eine <u>Energie oberhalb der Potentialstufe</u>, $E > V_0$.

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad q := \sqrt{\frac{2m(E - V - 0)}{\hbar^2}} < k$$

Die Lösungen in (I) und (II) sind dann

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-\,ikx} \tag{I}$$

$$\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{iqx} + D\,\mathrm{e}^{-\,iqx} \tag{II}$$

mit beliebigen Amplituden A, B, C, D

- Die Anschlussbedingungen an den Sprungstellen sind

$$A + B = C + D$$

$$\mathrm{i}k(A - B) = \mathrm{i}q(C - D)$$

Die Amplituden B, C der auslaufenden Wellen sollen in Abhängigkeit von den Amplituden der einlaufenden Wellen A, D bestimmt werden:

$$
\begin{aligned}
B - C &= -A + D \\
kB + qC &= kA + qD \\
\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ k & q \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{k+q} \begin{pmatrix} q & 1 \\ -k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

- Wir betrachten den Fall eines von links einlaufenden Teilchen, das heißt $A \neq 0$ und $D = 0$ (sodass $j_A \neq 0$und $j_D = 0$). Damit ist

  $$B = \frac{k-q}{k+q} A \quad C = \frac{2k}{k+q} A$$

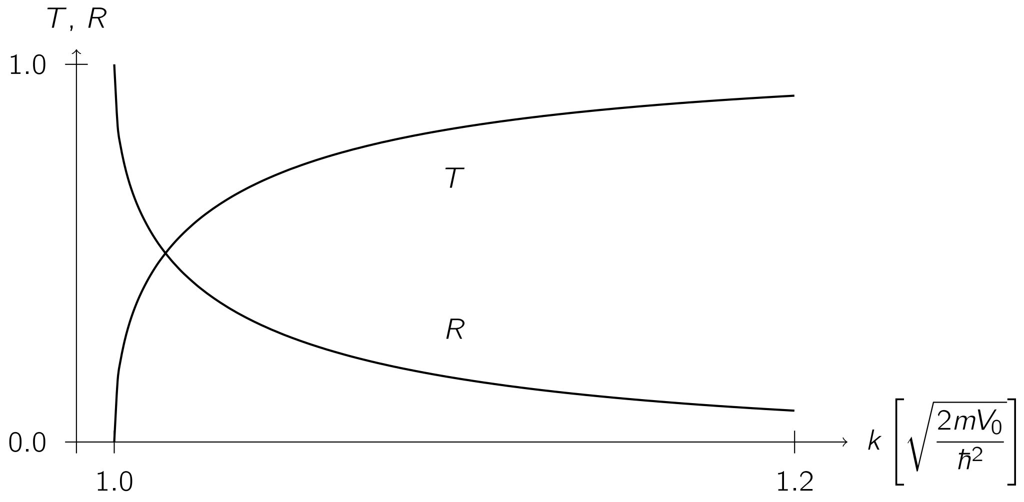
  Damit sind die Ströme

  $$
  \begin{aligned}
  j_A &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \\
  j_B &= -\frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 |A|^2 = -\left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 j_A \\
  j_C &= \frac{\hbar q}{m} \left(\frac{2k}{k+q} \right)^2 |A|^2 = \frac{4kq}{(k+q)^2} j_A
  \end{aligned}
  $$

- Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für ein von links mit einem Impuls $p = \hbar k$ (beziehungsweise mit einer kinetischen Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > V_0$) einfallenden Teilchens sind

  $$
  \begin{aligned}
  R &= \left| \frac{j_B}{j_A} \right| = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \qquad q = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \\
  T &= \left| \frac{j_C}{j_A} \right| = \frac{4kq}{(k+q)^2}
  \end{aligned}
  $$

  (Annahme: $k > \frac{2mV_0}{\hbar}$)
  Es gilt $R + T = 1$



Für Energien $E > V_0$ gibt es eine endliche Wahrscheinlichkeit, reflektiert zu werden!

- Das Eigenwertproblem

$$H\psi_k(x) = E_k\psi_k(x) \qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ist (für Wellen mit $E > V_0$ und $D = 0$, $A = 1$) gelöst mit

$$\psi_k = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k-q}{k+q} e^{-ikx} & : \quad x < 0 \\ \frac{2k}{k+q} e^{iqx} & : \quad x \geq 0 \end{cases}$$

Durch Superposition dieser Wellen können von links einlaufende Wellenpakete konstruiert werden

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk g(k)\, e^{-iw_k t}\psi_k(x)$$

- 2. Fall: Das Teilchen habe eine Energie unterhalb der Potentialstufe, $E < V_0$.

Die Schrödingergleichung ist nun

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\psi(x)$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x)$$

Mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \mu := \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

lauten die Lösungen in (I) und (II)

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{-\mu x} + D\,\mathrm{e}^{\mu x}$$

Die Lösungen in (I) sind wieder ebene Wellen. In (II) ergeben sich Exponentialfunktionen.

- Die Komponente $\mathrm{e}^{+\mu x}$ divergiert für $x \to \infty$. Die Wellenfunktion muss normierbar sein. Also fordern wir $D \equiv 0$. Die Anschlussbedingungen bei $x = 0$ liefern dann für den Fall eines von links einlaufenden Teilchens

$$B = \frac{k - \mathrm{i}\mu}{k + \mathrm{i}\mu} A \quad C = \frac{2k}{k + \mathrm{i}\mu} A$$

Die Energieeigenfunktion zum Energieeigenwert $E_k = \dfrac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ lauten damit ($A = 1$)

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \dfrac{k - \mathrm{i}\mu}{k + \mathrm{i}\mu}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & : \quad x \leq 0 \\ \dfrac{2k}{k + \mathrm{i}\mu}\,\mathrm{e}^{-\mu x} & : \quad x > 0 \end{cases}$$

- Die Wahrscheinlichkeitsdichte in $x > 0$ ist

$$|\psi_k(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \mu^2}\,\mathrm{e}^{-2\mu x} = \frac{4E}{V_0}\,\mathrm{e}^{-2\mu x}$$

Die Eindringtiefe ist

$$\frac{1}{\mu} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Die Eindringtiefe ist klein für große Massen und hohe Potentiale $V_0 \gg E$.

- Insbesondere für eine unendlich hohe Potentialstufe $V_0 \to \infty$ gilt

$$\psi_k(x) \propto \begin{cases} \sin kx & : \quad x < 0 \\ 0 & : \quad x \geq 0 \end{cases}$$

Das heißt, die Randbedingung für eine unendlich hohe Potentialstufe bei x_0 ist

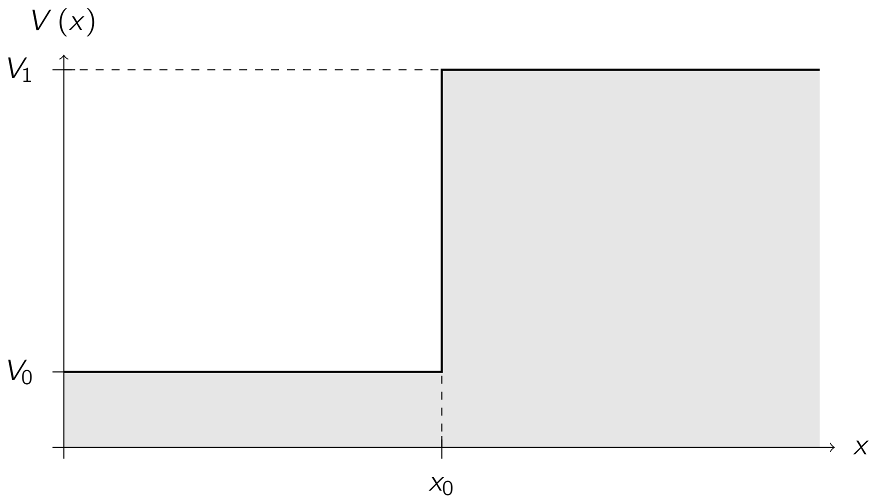
$$\psi(x_0) = 0$$

Die Ableitung der Wellenfunktion ist in x_0 unstetig!

1.8.2. Potentialschwelle

- Wir betrachten ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x \leq 0 \\ V_0 & : \quad 0 \leq x \leq l \\ 0 & : \quad l \leq x \end{cases}$$

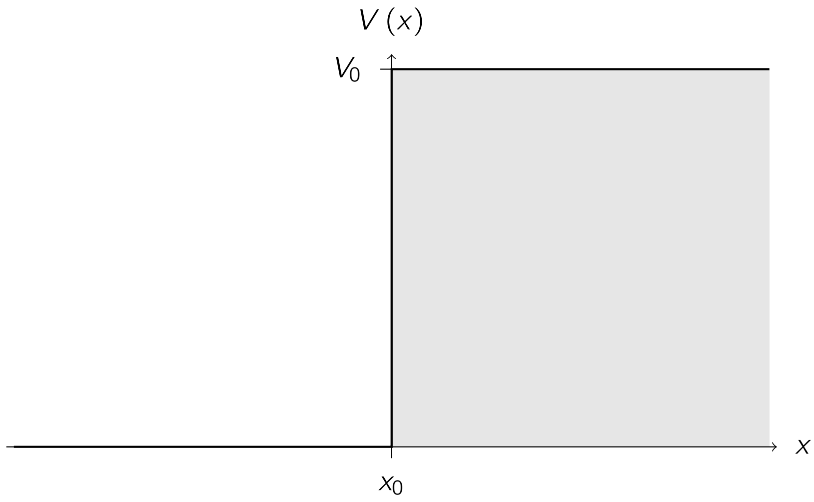


- <u>1. Fall:</u> Das Teilchen habe eine Energie <u>oberhalb der Potentialschwelle</u>, $E > V_0$. Die Lösung der Schrödingergleichung in den 3 Bereichen ist

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$
$$\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + D\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}$$
$$\psi(x) = F\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + G\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

wobei

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad q := \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} < k$$



- Die Anschlussbedingungen erfordern Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ bei $x = 0$ und $x = l$

$$A + B = C + D$$
$$k(A - B) = q(C - D)$$
$$C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}ql} + D\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ql} = F\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl} + G\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kl}$$
$$q\left(C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}ql} - C\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ql}\right) = k\left(F\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl} - G\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kl}\right)$$

Die auslaufenden Wellen B, F sollen für gegebene einlaufende Wellen A, G berechnet werden. Wir können uns auf ein von links einlaufendes Teilchen spezialisieren, $G = 0$.
Die Lösung (mit Matrixmethode, wie vorher) ist:

$$\begin{aligned} F &= \left[\cos ql - \mathrm{i}\frac{k^2 + q^2}{2kq}\sin ql\right]^{-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kl} A \\ B &= \mathrm{i}\frac{q^2 - k^2}{2kq}\sin ql\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl} F \end{aligned}$$

- Der transmittierte/reflektierte Strom ist

$$j_F = \frac{\hbar k}{m}|F|^2 \quad j_B = \frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

und der Reflexions- und Transmissionskoeffizient

$$\boxed{\begin{aligned} R &= \frac{j_B}{j_A} = \frac{\left(k^2 - q^2\right)^2 \sin^2 ql}{4k^2q^2 + \left(k^2 - q^2\right)^2 \sin^2 ql} \\ T &= \frac{j_F}{j_A} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + \left(k^2 - q^2\right)^2 \sin^2 ql} \end{aligned}}$$

Diskussion:

- Es gilt $R + T = 1$.
- Transmissionskoeffizient gegen Breite l der Schwelle (für feste Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ des Teilchens und Potentialhöhe V_0)
- Die Transmission besitzt sogenannte Streuresonanzen bei

$$\sin ql \quad \text{also} \quad ql = n\pi \quad n \in \mathbb{N}$$

also für eine Wellenzahl $q = \frac{n\pi}{l}$. Im Bereich der Barrieren entstehen dann stehende Wellen.

- 2.Fall: Wir betrachten ein Teilchen mit Energie unterhalb der Potentialschwelle, $E < V_0$. Die Lösung in (II) ist nun (wie vorher)

$$\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{-\mu x} + D\,\mathrm{e}^{+\mu x}$$

Die Lösung ist die gleiche wie für $E > V_0$ mit $q \to \mathrm{i}\mu$, $\mu = \sqrt{(V_0 - E)\frac{2m}{\hbar^2}}$. Der Reflexions- und Transmissionskoeffizient ist

$$R = \frac{\left(k^2 + \mu^2\right)^2 \sinh^2 \mu l}{4k^2\mu^2 + (k^2 + \mu^2)^2 \sinh^2 \mu l}$$
$$T = \frac{4k^2\mu^2}{4k^2\mu^2 + (k^2 + \mu^2)^2 \sinh^2 \mu l}$$

Diskussion:

- $T \neq 0$ sogar für $E < V_0$: Tunneleffekt
- Für kleine Energien E und lange Barrieren l, so dass

$$\mu l = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\, l \gg 1$$

gilt

$$T \approx \frac{16\,(E - V_0)^2}{V_0}\,\mathrm{e}^{-2\mu l}$$

Die Eindringtiefe ist wieder

$$\frac{1}{\mu} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

- Beispiel 1: Für ein Elektron mit Energie $E = 1\mathbf{eV}$, $V_0 = 2\mathbf{eV}$ ist die Eindringtiefe $\mu^{-1} \approx 2 \cdot 10^{-10}\mathbf{m} = 2\mathbf{Å}$. Bei einer Barriere mit $l = 1\mathbf{Å}$ ist die Transmissionswahrscheinlichkeit $T = 0.78$.

– Beispiel 2: Für ein Proton ($m_p = 1840 m_e$) mit $E = 1\mathbf{eV}$ und $V_0 = 2\mathbf{eV}$ ist $\mu^{-1} = 5 \cdot 10^{-12}\mathbf{m}$ und für $l = 1\text{\AA}$ ist $T = 4 \cdot 10^{-19}$

1.8.3. Der Potentialtopf

- Wir betrachten ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & : \quad |x| \leq l \\ 0 & : \quad |x| > l \end{cases}$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Die Zustände mit $E > 0$ entsprechenim wesentlichen denen der Potentialschwelle für ($E > V_0$). Welche Zustände mit $E < 0$ gibt es im Potentialtopf?

- Für $-V_0 < E < 0$ sind die Lösungen in den 3 Bereichen

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\mu x}$$
$$\psi(x) = B\cos kx + C\sin kx$$
$$\psi(x) = D\,\mathrm{e}^{-\mu x}$$

mit: