

KANTONSSCHULE MENZINGEN

Maturaarbeit im Fach Physik

Simulation quantenmechanischer Modelle

Christie Wong

Betreuerin: Anna Mohr

Korreferent: Peter Müller

6. Oktober 2023

Inhaltsverzeichnis

1 Abstract	4
2 Einleitung	5
3 Allgemeine Theorie	6
3.1 Schrödinger-Gleichung	6
3.1.1 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	6
3.1.2 Zeitentwicklungsoperator	6
3.1.3 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung	8
3.2 Wellenpaket	8
3.2.1 Heisenberg'sche Unschärferelation	8
3.2.2 Wellenpaket	8
3.2.3 Das Gaußsche Wellenpaket	9
3.3 Eigenfunktion und Eigenenergie	11
3.3.1 Eigenfunktion	11
3.3.2 Eigenenergie	12
4 Modell 1: Teilchen im Kasten	13
4.1 Theorie	14
4.1.1 Potential	14
4.1.2 Eigenfunktion	14
4.2 Simulation und Resultate	17
4.2.1 Simulation	17
4.2.2 Resultate	18
4.3 Interpretation	21
4.3.1 Ausbreitung des Wellenpakets	21
4.3.2 Superpositionsprinzip des Wellenpakets als Ursache der Interferenzmuster	21
4.3.3 Veränderung der Interferenzmuster mit der Zeit	21
4.3.4 Keine direkte physikalische Interaktion zwischen dem Wellenpaket und den Eigenzuständen	22
5 Modell 2: Der quantenharmonische Oszillatator	23
5.1 Theorie	24
5.1.1 Energiepotential	24
5.1.2 Eigenfunktion des harmonischen Oszillators	24
5.1.3 Eigenenergien	29
5.1.4 Aufenthaltswahrscheinlichkeit des klassischen harmonischen Oszillators	30
5.2 Simulation und Resultate	33
5.2.1 Simulation	33
5.2.2 Resultate	34
5.3 Interpretation	36
5.3.1 Grundzustand	36
5.3.2 Die klassische Grenze	36

5.3.3	Symmetrie	38
5.3.4	Überschreitung der Wendepunkte	39
6	Modell 3: Potentialbarriere	40
6.1	Theorie	41
6.1.1	Potential	41
6.1.2	Transmissionsfaktor	41
6.1.3	Resonanz	48
6.2	Simulation und Resultate	50
6.2.1	Simulation	50
6.2.2	Resultate	52
6.3	Interpretation	54
6.3.1	Vergleich der simulierten und berechneten Resultate	54
6.3.2	Einfluss des Verhältnisses $E : V_0$ auf die Transmission wenn $E < V_0$	54
6.3.3	Einfluss des $E : V_0$ Verhältnisses auf die Transmission wenn $E > V_0$	54
7	Diskussion	56
8	Literaturverzeichnis	57
9	Abbildungsverzeichnis	59
10	Anhang	60

1 Abstract

Drei verschiedene quantenmechanische Modelle werden mithilfe eines Python-Programms simuliert. Für jedes Modell wurde eine spezifische Eigenschaft der Quantenmechanik untersucht. Die drei Modelle sind: das Teilchen im Kasten, der harmonische Oszillator und die Potentialbarriere. Die untersuchten Eigenschaften sind: die Interferenzmuster eines Wellenpakets, der Übergang von quantenmechanischer zur klassischer Physik und der Tunneleffekt. Alle mathematischen Zusammenhänge, die für das Programm oder für die Hypothesen verwendet werden, werden von der Schrödingergleichung hergeleitet. Bei allen drei Modellen entsprechen die Hypothesen den Ergebnissen aus der Simulation.

2 Einleitung

Die Quantenmechanik weicht maßgeblich von der klassischen Mechanik ab und bildet ein weites und faszinierendes Forschungsfeld. In dieser Arbeit werden drei verschiedene quantenmechanische Modelle und ihre Eigenschaften untersucht. Zu jedem Modell wird eine zentrale Fragestellung formuliert, welche anschließend mithilfe eines Python-Programms untersucht und beantwortet wird. Diese Modelle repräsentieren quantenmechanische Systeme mit unterschiedlichen Energiepotentialen: das Modell des Teilchens im Kasten, der harmonische Oszillator sowie die Potentialbarriere. Die untersuchten Phänomene sind jeweils die Interferenz des Wellenpakets mit sich selbst, die Grenze zwischen klassischer und Quantenmechanik sowie der Tunneleffekt.

Das Python-Programm ermöglicht die Simulation von Quantenobjekten in eindimensionalen quantenmechanischen Modellen. Im Anhang finden Sie die eigens entwickelte, benutzerfreundliche App mit anpassbaren Parametern zur Simulation der Modelle. Der vollständige Python-Code ist ebenfalls im Anhang verfügbar.

Die Idee der Simulation wurde von einem ähnlichen Projekt von CodingPhysics inspiriert¹ sowie von einem Youtube-Video von Mr. P. Solver².

Alle Gleichungen und Zusammenhänge, die entweder für das Programm oder für die Hypothesen verwendet werden, werden von der Schrödingergleichung hergeleitet. Diese stellt das grundlegendste Konzept in der Quantenmechanik dar und ermöglicht Vorhersagen über das Verhalten von quantenmechanischen Teilchen.

¹CodingPhysics: *Schrodinger Equation Simulator* (Stand: o. D.). <http://www.schrodingerequation.online/>. [7.9.2023].

²Mr. P Solver: *Time-Dependent Schrodinger Equation in Python: Two Different Techniques* (Stand: 21.6.2021). <https://www.youtube.com/watch?v=kVjg3jbM3Pw&t=1176s>. [7.9.2023].

3 Allgemeine Theorie

In der Simulation wird die zeitliche Entwicklung eines Ausgangswellenpakets gemäß der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung im eindimensionalen Raum numerisch berechnet. Genauer gesagt wird das Wellenpaket $\psi(x, t_0)$ bei jeder neuen Zeiteinheit mit dem Zeitentwicklungsoperator \hat{U} der Schrödinger-Gleichung neu berechnet. Je nach der spezifischen Untersuchung kann das Ausgangswellenpaket entweder das Gaußsche Wellenpaket oder die Eigenfunktion des Systems sein.

$$\psi(x, t_{i+1}) = \hat{U}\psi(x, t_i) \quad (1)$$

3.1 Schrödinger-Gleichung

3.1.1 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist eine grundlegende Differentialgleichung der Quantenmechanik, die beschreibt, wie sich die Wellenfunktion eines physikalischen Systems im Laufe der Zeit und des Raums ändert. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi \quad (2)$$

ψ steht für die Wellenfunktion - eine komplexe Funktion, die den Zustand eines Teilchens repräsentiert. Sie enthält Informationen über verschiedene Aspekte des Teilchens wie beispielsweise Position, Impuls, Energie und Spin. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi|^2$ ergibt die Wahrscheinlichkeitsdichte, auch Aufenthaltswahrscheinlichkeit genannt, der Teilchenposition $P(x)$:

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \quad (3)$$

\hat{H} ist der Hamilton-Operator. Er setzt sich zusammen aus dem Operator der kinetischen Energie $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ und dem Operator der potentiellen Energie \hat{V} .

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

\hat{E} ist der Gesamtenergieoperator $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$. Daher lautet die vollständige, eindimensionale, zeitabhängige Schrödinger-Gleichung³:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V\psi(x, t) \quad (4)$$

3.1.2 Zeitentwicklungsoperator

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung liefert den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} , der in meinem Python-Programm Verwendung findet.

Zunächst werden die Variablen x und t aus $\psi(x, t)$ separiert. Neue Funktionen werden definiert: $\phi(x)$ beschreibt die räumliche Abhängigkeit von ψ , während $\xi(x)$ die zeitliche Abhängigkeit von ψ darstellt.

$$\psi(x, t) = \phi(x)\xi(t) \quad (5)$$

³Wikipedia Autoren: *Schrödinger-Gleichung* (Stand: 7.9.2023).
<https://de.wikipedia.org/wiki/Schr%C3%BCdinger-Gleichung>. [7.9.2023].

$\phi(x)\xi(t)$ wird in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (2) eingesetzt. Daraus ergibt sich:

$$\begin{aligned}\hat{E}\phi(x)\xi(t) &= \hat{H}\phi(x)\xi(t) \\ i\hbar \frac{\partial(\phi(x)\xi(t))}{\partial t} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)(\phi(x)\xi(t)) \\ i\hbar\phi(x) \frac{\partial\xi(t)}{\partial t} &= -\xi(t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + \hat{V}\phi(x)\xi(t)\end{aligned}$$

Die Gleichung wird durch $\phi(x)\xi(t)$ geteilt:

$$i\hbar \frac{1}{\xi(t)} \frac{\partial\xi(t)}{\partial t} = -\frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + \hat{V} \quad (6)$$

Die linke Seite der Gleichung, $i\hbar \frac{1}{\xi(t)} \frac{\partial\xi(t)}{\partial t}$, hängt ausschließlich von der Zeit ab. Auf der rechten Seite finden sich lediglich Terme, die von der Position x abhängen, nämlich $-\frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + \hat{V}$.

Um den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} zu ermitteln, ist es entscheidend, die linke Seite von Gleichung (6) zu betrachten.

$$i\hbar \frac{1}{\xi(t)} \frac{\partial\xi(t)}{\partial t} = \hat{H}$$

Die Gleichung wird mit ∂t multipliziert und durch $i\hbar$ geteilt.

$$\frac{\partial\xi(t)}{\xi(t)} = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \partial t$$

Anschließend wird die rechte Seite der Gleichung mit $\frac{i}{i}$ multipliziert, um die imaginäre Einheit im Nenner zu eliminieren.

$$\frac{\partial\xi(t)}{\xi(t)} = -\frac{i\hat{H}}{\hbar} \partial t$$

Im letzten Schritt erfolgt die Integration auf beiden Seiten:

$$\begin{aligned}\int \frac{\partial\xi(t)}{\xi(t)} dt &= \int -\frac{i\hat{H}}{\hbar} \partial t \\ \ln(\xi(t)) &= -\frac{i\hat{H}}{\hbar} t \\ \xi(t) &= e^{i\hat{H}t/\hbar}\end{aligned}$$

Der obige Ausdruck entspricht dem Zeitentwicklungsoperator. Dies wird besonders deutlich, wenn $\xi(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}$ in Gleichung (5) einsetzt:

$$\psi(x, t) = \phi(x)\xi(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\phi(x)$$

Er verkörpert die grundlegende Idee des Zeitentwicklungsoperators in der Gleichung $\psi(x, t_1) = \hat{U}\psi(x, t_0)$ (1). Der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} lautet daher ⁴:

$$\hat{U} = \xi(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}$$

⁴Uni Bielefeld: *Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems* (Stand: o.D.).
https://www.physik.uni-bielefeld.de/~borghini/Teaching/Theorie-II_17/05_23.pdf. [30.9.2023]

3.1.3 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung findet oft Anwendung in der Herleitung von anderen Zusammenhängen. Sie wird von $-\frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + \hat{V}$, der rechten Seite von Gleichung (6), abgeleitet.

$$-\frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + V = \hat{E}$$

Diese Gleichung wird mit $\phi(x)$ multipliziert:

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

Konventionell wird $\phi(x)$ durch $\psi(x)$ ersetzt. Somit lautet die zeitunabhängige Version der Schrödinger-Gleichung⁵:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \hat{V} \psi(x) = \hat{E} \psi(x) \quad (7)$$

3.2 Wellenpaket

3.2.1 Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Heisenbergsche Unschärferelation ist ein grundlegendes Prinzip der Quantenmechanik. Sie besagt, dass es unmöglich ist, zwei konjugierte physikalische Größen eines quantenmechanischen Systems, wie beispielsweise Ort und Impuls, gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit zu bestimmen⁶. Je genauer der Ort eines Teilchens bekannt ist, desto ungenauer ist das Wissen über seinen Impuls, und umgekehrt.

Mathematisch ausgedrückt, gilt für Ort x und Impuls p die Unschärferelation:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (8)$$

Dabei steht Δx für die Unsicherheit in der Ortsbestimmung und Δp für die Unsicherheit in der Impulsbestimmung. \hbar repräsentiert die reduzierte Plancksche Konstante.

3.2.2 Wellenpaket

Im Gegensatz zu klassischen Objekten lassen sich Quantenobjekte aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation nicht durch wohldefinierte Zustände mit präzisen Positionen und Impulsen beschreiben. Die Position eines quantenmechanischen Objekts muss anstelle von exakten Koordinaten durch ein Wellenpaket dargestellt werden.

Ein Wellenpaket ist eine Linearkombination verschiedener Wellen mit unterschiedlichen Wellenzahlen. Diese Superposition ermöglicht eine präzise Lokalisierung im Raum. Das Wellenpaket bietet eine ausgewogene Darstellung eines quantenmechanischen Teilchens, die es erlaubt, sowohl den Ort des Teilchens als auch seine Bewegungseigenschaften mit einer gewissen Unsicherheit zu beschreiben. Die Überlagerung verschiedener Wellen trägt dazu bei, dass das Teilchen nicht nur an einem einzigen Punkt konzentriert ist, sondern sich auch über einen Bereich erstreckt. Zudem hat ein Wellenpaket nicht nur einen einzigen,

⁵ETH Zürich: *Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* (Stand: o.D.).
https://content/dam/ethz/special-interest/chab/physical-chemistry/ultrafast-spectroscopy-dam/documents/lectures/allgemeinechemieHS21/Folien/ACPCI_HS21_W11.pdf. [30.9.2023]

⁶ETH Zürich: *9 Grundlagen der Quantenmechanik* (Stand: o.D.).
<https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch9.html>. [7.9.2023].

wohldefinierten Impuls, sondern eine gewisse Bandbreite von Impulsen um einen durchschnittlichen Wert. Diese Darstellung entspricht also der Heisenbergschen Unschärferelation.⁷

3.2.3 Das Gaußsche Wellenpaket

Eine konkrete mathematische Realisierung dieser Addition von ebenen Wellen zur Bildung einer lokalisierten Funktion ist das Gaußsche Wellenpaket. Aus diesem Grund wird in einigen Untersuchungen das Gaußsche Wellenpaket als Ausgangswellenfunktion verwendet.

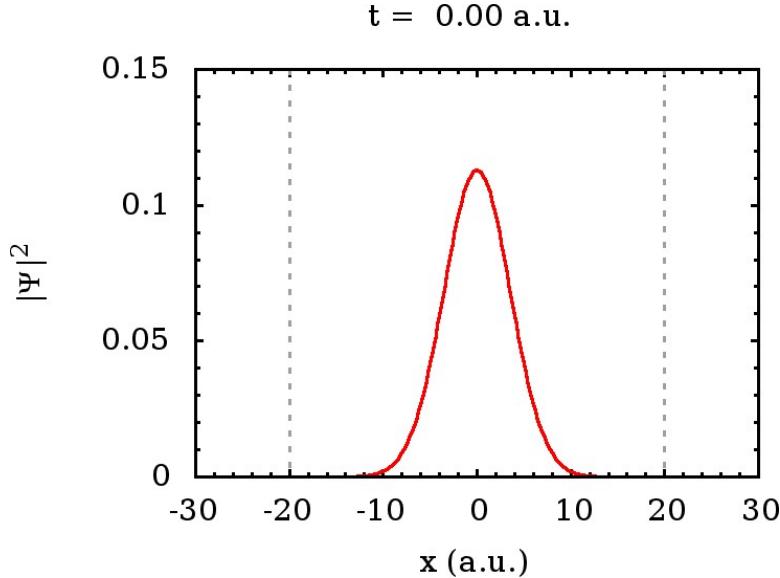


Abbildung 1: Ein Gaußsches Wellenpaket in einem Potentialtopf.

Quelle: Uni Frankfurt: *Überlagerung gebundener Zustände*.

<https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/qm1-ss09/wavepack/fin-potb1.gif> [30.9.2023].

Die Herleitung des Gaußschen Wellenpakets bei $t = 0$ erfolgt wie folgt:

Es beginnt mit einer Superposition von ebenen Wellen, wobei angenommen wird, dass alle Wellen entlang der x-Richtung propagieren. Dies führt zur eindimensionalen allgemeinen Fourier-Entwicklung von ebenen Wellen:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Die Funktion $a(k)$ repräsentiert die Gewichtung der ebenen Wellen in der Umgebung der Wellenzahl k , wobei ω die Kreisfrequenz ist.

Um ein lokalisiertes Wellenpaket zu erzeugen, wird $a(k)$ als eine Gaußverteilung von Wellenzahlen gewählt. Wellenzahlen stellen die räumliche Frequenz der Wellenfunktion dar und beschreiben das Verhalten des Teilchens.

$$a(k) = \frac{A}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(k - k_0)^2}{2\sigma_k^2} \right]$$

⁷Fowler, Michael: *Wave Equations, Wavepackets and Superposition* (Stand: o.D.).
[https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_\(Fowler\)/01%3A_Reviewing_Elementary_Stuff/1.03%3A_Wave_Equations%2C_Wavepackets_and_Superposition](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_(Fowler)/01%3A_Reviewing_Elementary_Stuff/1.03%3A_Wave_Equations%2C_Wavepackets_and_Superposition). [30.9.2023].

Dabei ist k_0 der mittlere Wellenzahlwert und σ_k die Standardabweichung der Verteilung der Wellenzahlen (oder Impulse) im Wellenpaket.

Für $t = 0$ ergibt sich:

$$\Psi(x, 0) \equiv \psi(x) = \frac{A}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{(k - k_0)^2}{2\sigma_k^2} \right] e^{ikx} dk$$

oder

$$\psi(x) = \frac{Ae^{ik_0x}}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{k'^2}{2\sigma_k^2} \right] e^{ik'x} dk', \quad \text{wobei } k' \equiv k - k_0$$

Wenn $u \equiv \frac{k'}{\sqrt{2}\sigma_k}$ gesetzt wird, so dass $dk' = \sqrt{2}\sigma_k du$, ergibt sich:

$$\psi(x) = \frac{Ae^{ik_0x}}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{2}\sigma_k \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \cdot e^{i\sqrt{2}\sigma_k xu} du = \frac{A}{\sqrt{\pi}} e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\left(u^2 - i\sqrt{2}\sigma_k xu \right) \right] du$$

Indem das Quadrat vervollständigt wird, ergibt sich:

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{\sigma_k^2 x^2}{2} \right] e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz, \quad \text{wobei } z \equiv u - \frac{i\sigma_k x}{\sqrt{2}}$$

Das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz$ hat den Wert $\sqrt{\pi}$, was ergibt:

$$\psi(x) = A \exp \left[-\frac{\sigma_k^2 x^2}{2} \right] e^{ik_0x}$$

oder

$$\psi(x) = A \exp \left[-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} \right] e^{ik_0x}, \quad \text{wobei } \sigma_x = \frac{1}{2\sigma_k}$$

Hierbei ist σ_x die Standardabweichung der Verteilung der Positionen im Wellenpaket. Es gibt an, wie stark das Wellenpaket im Raum verteilt ist. Ein schmales Wellenpaket (wenn σ_x klein ist) repräsentiert eine genau lokalisierte Position, während ein breites Wellenpaket (wenn σ_x groß ist) eine größere räumliche Unschärfe hat. Aufgrund der Heisenberg'schen Unschärferelation (8) muss $\Delta x \Delta p = \sigma_x \sigma_k \geq \frac{\hbar}{2}$ erfüllt sein. Unter der Annahme, dass $\hbar = 1$, ergibt sich, dass $\sigma_x \sigma_k \geq \frac{\hbar}{2}$. Daher beträgt $\sigma_x = \frac{1}{2\sigma_k}$, um die Unsicherheitsrelation zu erfüllen.

Hier steht x^2 eigentlich für $(x - x_0)^2$, aber es wird angenommen, dass x_0 , der Mittelwert der Position des Teilchens x , null ist. In der Simulation ist x_0 nicht immer null, wie bislang angenommen wurde. Daher wird x^2 durch $(x - x_0)^2$ ersetzt.

$$\psi(x) = A \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2} \right] e^{ik_0x}$$

Des Weiteren hat der Impuls p_0 in der Simulation eine größere Bedeutung als die Wellenzahl k_0 . Der Zusammenhang $p_0 = \hbar k_0$ ist allgemein bekannt. Da wir hier von $\hbar = 1$ ausgehen, können wir k_0 einfach durch p_0 ersetzen.

$$\psi(x) = A \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2} \right] e^{ip_0x}$$

Schließlich wird der Normalisierungsfaktor A gesucht. Um A für die gegebene Wellenfunktion $\psi(x)$ zu finden, wird die Bedingung verwendet, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ über den gesamten Raum zu 1 integriert sein muss. Mathematisch ausgedrückt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Durch Einsetzen des Ausdrucks für $\psi(x)$ ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right] dx = 1$$

Da $|A|$ eine Konstante ist, kann sie aus dem Integral herausgezogen werden:

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right] dx = 1$$

Als Nächstes erkennt man, dass das Integral auf der linken Seite ein Gaußsches Integral ist, das zu $\sqrt{2\pi}\sigma_x$ ausgewertet wird. Somit ergibt sich:

$$|A|^2 \sqrt{2\pi}\sigma_x = 1$$

Durch Umstellen von $|A|$ erhält man:

$$|A| = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_x}}$$

Folglich lautet der Normalisierungsfaktor A :

$$A = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}}$$

Die Gaußsche Wellenpaket bei $t = 1$, die in der Simulation als Ausgangswellenfunktion verwendet wird, lautet daher⁸:

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}\right] e^{ip_0 x} \quad (9)$$

3.3 Eigenfunktion und Eigenenergie

3.3.1 Eigenfunktion

In Bezug auf die Schrödingergleichung bezieht sich eine Eigenfunktion (auch Eigenzustand genannt) auf eine spezifische Lösung der Schrödingergleichung. Genauer gesagt handelt es sich dabei um eine Wellenfunktion, die unter der Wirkung des Hamiltonoperators lediglich mit einem Skalar multipliziert wird. Mathematisch ausgedrückt bedeutet das, wenn $\psi(x)$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (7) ist, ist $\psi(x)$ auch eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators \hat{H} und des Gesamtenergieoperators \hat{E} .

⁸Schwartz, Matthew: *Wave Packets and Dispersion* (Stand: o.D).
<https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/lecture11-wavepackets.pdf>. [8.9.2023].

Eigenfunktionen spielen eine entscheidende Rolle in der Quantenmechanik, da sie die Zustände des Systems beschreiben, in denen messbare physikalische Größen (wie Energie, Impuls, etc.) wohldefinierte Werte haben.⁹

3.3.2 Eigenenergie

In Bezug auf die Schrödingergleichung bezieht sich der Begriff "Eigenenergie" auf die spezifischen Energiewerte, die einem quantenmechanischen System zugeordnet sind. Diese Energiewerte sind Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für ein gegebenes Potential. Mathematisch gesehen, wenn $\psi(x)$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (7) ist, dann ist E die Eigenenergie des Systems.

Die Eigenenergie repräsentiert somit die möglichen Energiezustände, die das System einnehmen kann. In einem physikalischen System können die Eigenenergien diskrete Werte (wie in einem quantisierten System) oder kontinuierliche Werte (wie in einem unendlich ausgedehnten Potentialbrunnen) annehmen, abhängig von den spezifischen Bedingungen und dem Potential, dem das System unterworfen ist.¹⁰

⁹ETH Zürich: *9 Grundlagen der Quantenmechanik* (Stand: o.D.).

<https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch9.html>. [7.9.2023].

¹⁰Ebd.

4 Modell 1: Teilchen im Kasten

Das Konzept des 'Teilchens im Kasten' ist ein fundamentales Modell in der Quantenmechanik, das dazu dient, das Verhalten eines Teilchens in einem begrenzten Raum zu untersuchen. Hier wird das Teilchen als eine Welle betrachtet, die sich innerhalb eines unendlich tiefen Potentials bewegt, welches den begrenzten Raum einschließt. Dieses Modell ermöglicht es, grundlegende Konzepte wie Eigenfunktionen zu erforschen und bildet eine Grundlage für das Verständnis komplexerer quantenmechanischer Systeme.¹¹

In dieser Untersuchung wird ein Gaußsches Wellenpaket ohne Anfangsgeschwindigkeit im Zentrum simuliert. Das Wellenpaket sollte sich ausbreiten und Interferenzmuster erzeugen. Bei der Experimentierung mit der Simulation ist mir aufgefallen, dass einige dieser Interferenzmuster den Eigenfunktionen dieses Systems ähneln. Daher ist mein Ziel, diese Hypothese zu überprüfen und die Interferenzmuster zu finden, die die gleichen Nullstellen wie die Eigenfunktionen aufweisen.

Im theoretischen Teil werden die Eigenfunktionen dieses Potentialsystems hergeleitet. Anschließend wird ein Gaußsches Wellenpaket in einem unendlichen Potentialtopf mit dem Python-Programm simuliert. Dabei lässt sich feststellen, wann die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion des Wellenpakets die gleichen Nullstellen hat wie die Eigenzustände.

¹¹Cruzeiro, V., Gao, X. & Kleiman, V.: *Particle in a Finite Potential Box (Python Notebook)* (Stand: o.D.).
[https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Interactive_Applications/Jupyter_Notebooks/Particle_in_a_Finite_Potential_Box_\(Python_Notebook\)](https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Interactive_Applications/Jupyter_Notebooks/Particle_in_a_Finite_Potential_Box_(Python_Notebook)) [7.9.2023].

4.1 Theorie

4.1.1 Potential

Ein freies Teilchen ist innerhalb eines unendlich hohen Kastenpotentials eingeschlossen (vgl. Abb. 2). Es wird angenommen, dass der Kasten eindimensional ist und eine Breite von a hat. Mathematisch ausgedrückt:

$$\begin{cases} V = \infty & \text{wenn } x \leq 0 \\ V = 0 & \text{wenn } 0 < x < a \\ V = \infty & \text{wenn } x \geq a \end{cases} \quad (10)$$

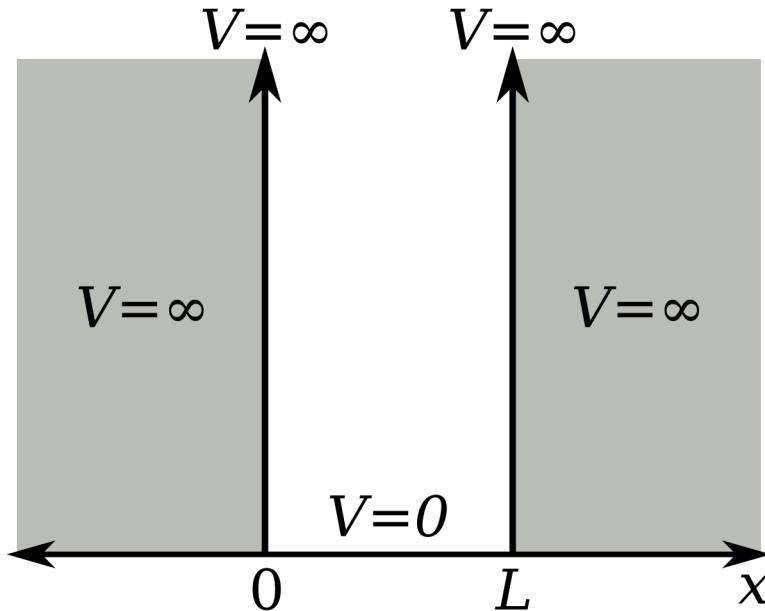


Abbildung 2: Das Potential ist außerhalb des Potentialkastens unendlich groß, im Inneren gleich null.

Hier ist die Breite des Kastens L statt a . Quelle: Wikimedia: *Infinite Potential Well*.

https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/27/Infinite_potential_well.svg[26.9.2023].

4.1.2 Eigenfunktion

Bestimmung der Wellenfunktion wo $V = 0$

Aufgrund des Potentials (10) kann sich das Teilchen innerhalb des begrenzten Raums, des "Kastens", bewegen, jedoch kann es den Kasten nicht verlassen. Daher muss die Lösung $\psi(x)$ der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung bestimmte Bedingungen erfüllen:

$$\begin{cases} \psi(x) = 0 & \text{wenn } x \leq 0 \\ \psi(x) \neq 0 & \text{wenn } 0 < x < a \\ \psi(x) = 0 & \text{wenn } x \geq a \end{cases} \quad (11)$$

Um die passende Wellenfunktion zu finden, beginnt man mit der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (7) und betrachtet den Bereich $0 < x < a$, in dem das Potential $V = 0$ ist.

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

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \quad (12)$$

Durch folgende Definition von der Wellenzahl k kann die Gleichung vereinfacht werden:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (13)$$

Wenn k in die vorherige Gleichung (12) eingesetzt wird, erhält man:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

Die allgemeine Lösung für die obige Differenzialgleichung lautet ¹²:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (14)$$

Bestimmung der Konstanten der Wellenfunktion

Hierbei sind A und B Konstanten, die noch gefunden werden müssen. Wenn diese Konstanten richtig gewählt werden, erfüllt die Funktion die Bedingungen von (11). Eine dieser Bedingungen besagt, dass ψ an den Grenzen des Kastens, also bei $x = 0$ und $x = a$, zwingend 0 sein muss.

Man kann zunächst die Bedingung $\psi(0) = 0$ betrachten. Setzt man $x = 0$ in Gleichung (14) ein, erhält man:

$$\psi(0) = A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0)$$

$$\psi(0) = A \cdot 0 + B \cdot 1$$

$$\psi(0) = B$$

Da $\psi(0) = 0$ (vgl. (11)), muss folglich $B = 0$ sein. Daher kann $B \cos(kx)$ aus Gleichung (14) gestrichen werden. Es verbleibt:

$$\psi(x) = A \sin(kx) \quad (15)$$

Als nächstes wird die Grenze $x = a$ betrachtet. Dort muss die Wellenfunktion $\psi(a) = A \sin(ka) = 0$ sein (vgl. (11)). Man kann die Konstante A nicht als 0 setzen, denn das würde bedeuten, dass $\psi(x)$ für alle x gleich 0 wäre. Das wiederum würde bedeuten, dass kein Teilchen, selbst innerhalb des Kastens, existiert. Stattdessen muss $\sin(ka) = 0$ sein. Da bekannt ist, dass $\sin(x) = 0$, wenn x ein Vielfaches von π ist, folgt:

$$ka = n\pi, \quad \text{wobei } n = 1, 2, 3 \dots \quad (16)$$

¹²MIT OpenCourseWare: *Particle in a box* (Stand: Frühling 2011). https://ocw.mit.edu/courses/6-007-electromagnetic-energy-from-motors-to-lasers-spring-2011/resources/mit6_007s11_lec40/ [7.9.2023].

Normalisierung der Wellenfunktion

Schließlich wird Gleichung (15) normalisiert:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_0^a \psi^* \psi dx = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = A^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx = 1$$

Unter Verwendung der trigonometrischen Identität $\sin^2(\theta) = \frac{1-\cos(2\theta)}{2}$ kann $\sin^2(kx)$ umgeschrieben werden.

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \int_0^a \frac{1 - \cos(2kx)}{2} dx = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \left(\int_0^a \frac{1}{2} dx - \int_0^a \frac{\cos(2kx)}{2} dx \right) = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \left(\frac{x}{2} \Big|_0^a - \frac{\sin(2kx)}{4k} \Big|_0^a \right) = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \left(\frac{a}{2} - 0 - \frac{\sin(2ka)}{4k} - \frac{\sin(2k \cdot 0)}{4k} \right) = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{\sin(2ka)}{4k} - 0 \right) = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{\sin(2ka)}{4k} \right) = 1 \end{aligned}$$

Es ist bekannt, dass $ka = n\pi$ (16). Dieser Zusammenhang wird in die obige Gleichung eingesetzt.

$$\langle \psi | \psi \rangle = A^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{\sin(2n\pi)}{4k} \right) = 1$$

Da n eine ganze Zahl ist und der Sinus eines Vielfachen von π gleich 0 ist, ergibt sich $\frac{\sin(2n\pi)}{4k} = 0$. Es verbleibt:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= A^2 \frac{a}{2} = 1 \\ A &= \sqrt{\frac{2}{a}} \end{aligned}$$

Es wird daher ersichtlich, dass der Normalisierungsfaktor $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ ist. Diese Definition wird erneut in Gleichung (15) eingesetzt. Damit erhält man die Eigenfunktion, die die Bedingungen des Systems erfüllt.

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x), \quad \text{wobei } ka = n\pi \tag{17}$$

Dabei steht n für das quantisierte Energieniveau des Systems.¹³

¹³Professor Dave Explains: *Particle in a Box Part 1: Solving the Schrödinger Equation* (Stand: 11.9.2020).
<https://youtu.be/LBB39u8dNw0?si=6GsA6KQpAMUFwWwm> [7.9.2023]

4.2 Simulation und Resultate

4.2.1 Simulation

Es wird das Kastenpotential (10) als das zugrundeliegende Potential und das Gaußsche Wellenpaket (9) als Ausgangswellenfunktion für die Simulation verwendet. Das Gaußsche Wellenpaket wird ohne anfänglichen Impuls ($p_0 = 0$) im Zentrum des Kastens simuliert.

```
def kastenpotential():
    # Unendlich hohe potentielle Energie an den Rändern - für das Teilchen im Kasten
    V = np.zeros(grid)
    V[0] = np.inf
    V[-1] = np.inf
    return V

def gaussche_wellenpaket(x, x0, sigma0, p0):
    # Gaußsches Wellenpaket bei  $x_0$  +/- Breite  $\sigma_0$  mit Energie  $E$ .
    A = (2 * np.pi * sigma0**2)**(-0.25)
    return A * np.exp(1j*p0*x - ((x - x0)/(2 * sigma0))**2)
```

Abbildung 3: Die Funktion "kastenpotential" und "gaussche_wellenpaket" werden in dieser Untersuchung verwendet.

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen $|\psi(x)|^2$ (3) von den ersten drei Eigenfunktionen $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)$ (17) dieses Systems werden berechnet. Daraufhin werden ihre Nullstellen ermittelt.

```
def nullstellen_eigenfunktion():
    # Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Eigenfunktion
    def eigenfunktion_wahr(n, a, x):
        eigenstate = np.sqrt(2/a)*np.sin(n*np.pi*x/a)
        return eigenstate.real**2 + eigenstate.imag**2

    # Die Wahrscheinlichkeitsdichten der Eigenfunktionen
    wahr_e1 = eigenfunktion_wahr(n=1, a=a, x=x)
    wahr_e2 = eigenfunktion_wahr(n=2, a=a, x=x)
    wahr_e3 = eigenfunktion_wahr(n=3, a=a, x=x)

    # Listen für die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichten der Eigenfunktionen
    null_wahr_e1 = []
    null_wahr_e2 = []
    null_wahr_e3 = []

    # Die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichten der Eigenfunktionen
    for i in range(len(wahr_e1)):
        if round(wahr_e1[i], 2) == 0.00:
            null_wahr_e1.append(i)
        if round(wahr_e2[i], 2) == 0.00:
            null_wahr_e2.append(i)
        if round(wahr_e3[i], 2) == 0.00:
            null_wahr_e3.append(i)

    return null_wahr_e1, null_wahr_e2, null_wahr_e3
```

Abbildung 4: Die Funktion "nullstellen_eigenfunktion" gibt die Nullstellen von den Wahrscheinlichkeitsdichten der ersten drei Eigenfunktionen zurück

Schließlich werden die Zeiten gesucht, zu denen die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets mit denen der Eigenfunktionen übereinstimmen. Die maximale Zeit ist 110.

```
# Wann stimmen die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets mit denjenigen der Eigenfunktion überein?
def übereinstimmung():

    # Listen für die Zeiten, wobei die Nullstellen des Wellenpakets mit denjenigen der Eigenfunktion übereinstimmen
    n1 = []
    n2 = []
    n3 = []

    for i in range(max_zeit):
        l = aufenthaltswahrscheinlichkeit[i]

        # Für die Eigenfunktion mit Energieniveau n = 1
        if x in round(l[0:196], 2) == 0.00:
            if x in round(l[415:610], 2) == 0.00:
                n1.append(i)

        # Für die Eigenfunktion mit Energieniveau n = 2
        if x in round(l[0:98], 2) == 0.00:
            if x in round(l[415:610], 2) == 0.00:
                if x in round(l[927:1024], 2) == 0.00:
                    n2.append(i)

        # Für die Eigenfunktion mit Energieniveau n = 3
        if x in round(l[0:66], 2) == 0.00:
            if x in round(l[277:407], 2) == 0.00:
                if x in round(l[618:748], 2) == 0.00:
                    if x in round(l[959:1024], 2) == 0.00:
                        n3.append(i)

    return n1, n2, n3
```

Abbildung 5: Die Funktion ”nullstellen_eigenfunktion” gibt die Zeiten zurück, zu denen die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Wellenpakets und diejenigen des Eigenzustands übereinstimmen.

4.2.2 Resultate

Zu Beginn breitet sich das Wellenpaket vom Zentrum aus, woraufhin Interferenzmuster auftreten. Für den Eigenzustand mit der Energieniveau $n = 1$ stimmen die Nullstellen in den Zeiten von $t = 0$ bis $t = 15$ überein. Im Fall des Eigenzustands mit der Energieniveau $n = 2$ sind die Nullstellen in den Zeiten von $t = 98$ bis $t = 104$ identisch. Beziüglich des Eigenzustands mit der Energieniveau $n = 3$ sind die Nullstellen in den Zeiten von $t = 70$ bis $t = 75$ übereinstimmend. Diese Übereinstimmungen der Wahrscheinlichkeitsdichten des Wellenpakets und des Eigenzustands werden im Folgenden veranschaulicht.

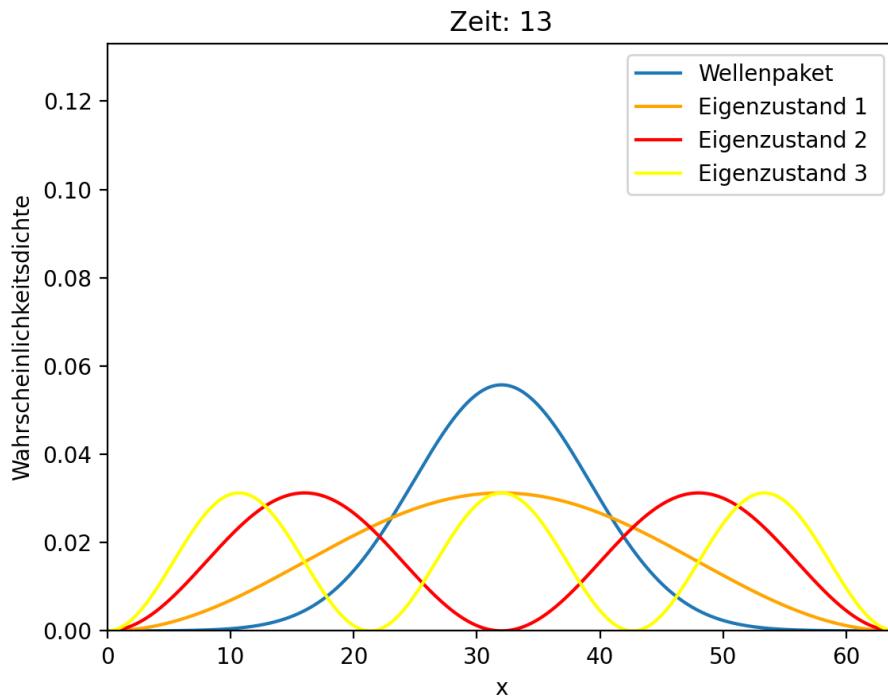


Abbildung 6: Übereinstimmung der Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets mit denen des Eigenzustandes mit Energieniveau 1 (orange Linie).

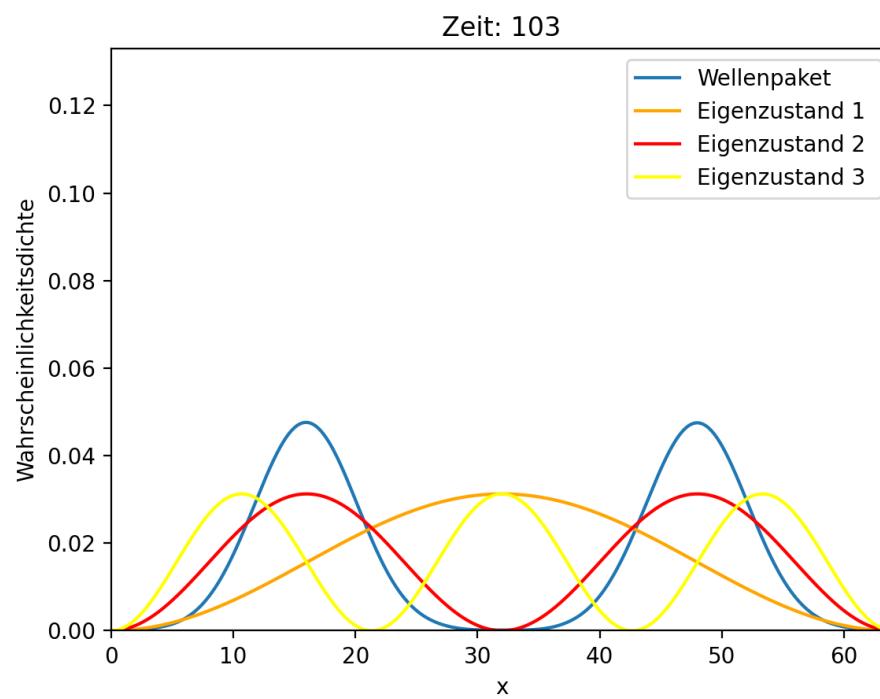


Abbildung 7: Übereinstimmung der Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets mit denen des Eigenzustandes mit Energieniveau 2 (rote Linie).

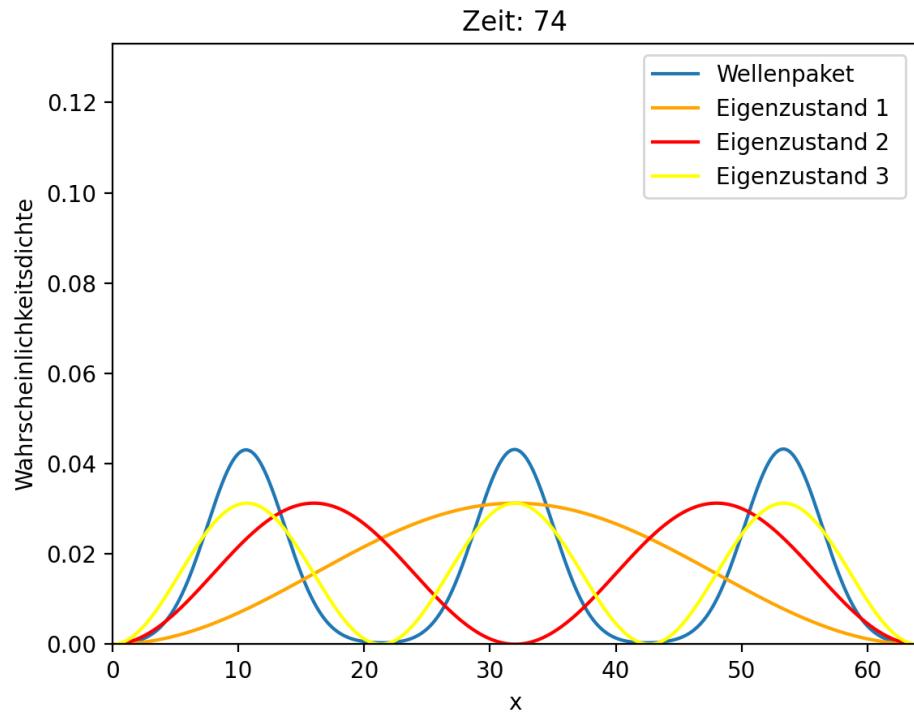


Abbildung 8: Übereinstimmung der Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets mit denjenigen des Eigenzustandes mit Energieniveau 3 (gelbe Linie).

4.3 Interpretation

4.3.1 Ausbreitung des Wellenpakets

Gemäß dem Heisenbergschen Unschärfeprinzip gibt es eine grundlegende Grenze dafür, wie präzise wir gleichzeitig die Position und den Impuls eines Teilchens kennen können. Im Fall eines Gaußschen Wellenpakets ohne anfänglichen Impuls ist seine anfängliche Position gut definiert, was bedeutet, dass sein anfänglicher Impuls sehr unsicher ist. Der Begriff "Impulszustände" bezieht sich in der Quantenmechanik auf die verschiedenen möglichen Impulswerte, die ein Teilchen haben kann. Jeder dieser Impulszustände entspricht einem spezifischen Eigenwert des Impulsoperators. Im Laufe der Zeit wird das Wellenpaket zu einer Superposition eines breiteren Spektrums von Impulszuständen. Dies führt dazu, dass sich die verschiedenen Impulskomponenten des Wellenpakets manifestieren und somit zu einer Ausbreitung im Ortsraum führen.¹⁴

4.3.2 Superpositionsprinzip des Wellenpakets als Ursache der Interferenzmuster

Gemäß der Quantenmechanik kann jede Wellenfunktion als Integral von Energieeigenzuständen ausgedrückt werden, was als Superpositionsprinzip bekannt ist. Ein Gaußsches Wellenpaket kann daher als Superposition verschiedener Energieeigenzustände des unendlichen Potentialkastens betrachtet werden. Jeder dieser Energieeigenzustände entspricht einem bestimmten Energiewert des Systems. Diese Eigenzustände haben assoziierte Phasenfaktoren, die durch die Energie des Zustands und den Zeitpunkt, zu dem das System beobachtet wird, bestimmt werden. Der Phasenfaktor eines Eigenzustands ist eine komplexe Zahl, die die Interferenzmuster beeinflusst, wenn verschiedene Eigenzustände überlagert werden. Er bestimmt die relativen Verschiebungen in den Oszillationen der Wellenfunktionen. Wenn die Phasen der beteiligten Eigenzustände so ausgerichtet sind, dass ihre Spitzen zusammenfallen, verstärken sie sich gegenseitig. Das bedeutet, dass bestimmte Bereiche des Raums konstruktive Interferenz erfahren (wo sich die Amplituden addieren), während andere destruktive Interferenz erfahren (wo sich die Amplituden aufheben). Diese Ausrichtung kann zu Spitzen in der Wahrscheinlichkeitsdichte führen, die den Spitzen der Eigenzustände entsprechen.¹⁵

4.3.3 Veränderung der Interferenzmuster mit der Zeit

Diese Ausrichtung ist nicht von Dauer, sondern ein sich dynamisch verändernder Prozess. Die Interferenzmuster entwickeln sich im Laufe der Zeit weiter, und sie können sich aufgrund der sich ändernden Gewichtungskoeffizienten zu verschiedenen Zeitpunkten mit unterschiedlichen Eigenfunktionen ausrichten.

Mit der Zeit entwickelt sich der Zustand des Systems gemäß der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Dies hat zur Folge, dass sich die Phasenfaktoren der Energieeigenzustände verändern, was wiederum zu Veränderungen in den Interferenzmustern führt. Die Entwicklung der Phasenfaktoren verändert die Gewichtungskoeffizienten der Eigenzustände in der Wellenfunktion. Die Gewichtungskoeffizienten bestimmen die relative Bedeutung dieser verschiedenen Zustände im Interferenzprozess. Das heißt, wenn ein bestimmter Eigenzustand einen höheren Gewichtungskoeffizienten hat, wird er einen größeren Einfluss auf das resultierende Interferenzmuster haben. Umgekehrt werden Eigenzustände mit niedrigeren

¹⁴Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen: *Gaussian wave packets* (Stand: o.D.).

<https://www.cond-mat.de/teaching/QM/JSim/wpack.html>. [7.9.2023].

¹⁵Weidemann, Tom: *Superposition and Interference* (Stand: o.D.).

https://phys.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD%3A_Physics_9B__Waves_Sound_Optics_Thermodynamics_and_Fluids/01%3A_Waves/1.04%3A_Superposition_and_Interference. [1.10.2023]

Gewichtungskoeffizienten einen geringeren Einfluss haben. Sie bestimmen, welche Zustände den Interferenzprozess dominieren und folglich das resultierende Interferenzmuster prägen. Das bedeutet, dass die relative Bedeutung verschiedener Energieeigenzustände im Laufe der Zeit variieren kann. Daher können sich zu bestimmten Zeitpunkten die Interferenzmuster so ausrichten, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte eines Teilchens der einer bestimmten Eigenfunktion ähnelt.¹⁶

4.3.4 Keine direkte physikalische Interaktion zwischen dem Wellenpaket und den Eigenzuständen

Es ist wichtig zu betonen, dass dieses Phänomen aus der mathematischen Natur der Wellenfunktionen in der Quantenmechanik entsteht. Die Interferenzmuster repräsentieren die komplexe Überlagerung verschiedener Zustände, und das Ausrichten von Knoten des Interferenzmusters mit Eigenzuständen ist ein mathematischer Zufall. Mit anderen Worten, dies ist ein probabilistisches Phänomen. Die Ähnlichkeit ist eine Konsequenz der mathematischen Struktur der Wellenfunktionen und der Prinzipien der Überlagerung und Interferenz in der Quantenmechanik. Dies impliziert keine direkte physikalische Interaktion zwischen dem Wellenpaket und den Eigenzuständen. Es ist eine Manifestation des wellenartigen Verhaltens von quantenmechanischen Teilchen¹⁷.

Dieses Phänomen betont die wellenartige Natur von quantenmechanischen Teilchen. Es ist eine Manifestation des Überlagerungsprinzips, das es Teilchen erlaubt, in einer Kombination von Zuständen zu existieren.

¹⁶, Matthew: *Wave Packets and Dispersion* (Stand: o.D). <https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/lecture11-wavepackets.pdf>. [8.9.2023].

¹⁷ ebd.

5 Modell 2: Der quantenharmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator beschreibt ein System, in dem eine Masse an einem Federpendel oder einer ähnlichen schwingenden Struktur befestigt ist. In der klassischen Physik folgt die Bewegung dieser Masse einer sinusförmigen Schwingung, wobei die Auslenkung von der Gleichgewichtslage proportional zur auf die Masse wirkenden Kraft ist. In der Quantenmechanik wird der harmonische Oszillator zu einem quantisierten System, das diskrete Energieniveaus aufweist. Statt einer kontinuierlichen Bewegung und Energie können sich die Teilchen nur in bestimmten Energiezuständen befinden, die durch Quantenzahlen n charakterisiert werden.

Ich habe mich gefragt, wie sich die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens in einem harmonischen Oszillator verändert, wenn die Quantenzahl n größer wird. Die Ergebnisse sollen parallel mit den klassischen Resultaten verglichen werden. Meine Hypothese ist, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion mit steigendem n der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion ähnlicher wird, da die zunehmende Quantenzahl den Übergang zur klassischen Physik repräsentiert.

Im theoretischen Teil werden die notwendigen Zusammenhänge hergeleitet, die im Programm verwendet werden sollen. Das Python-Programm simuliert die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktionen der Eigenzustände bei verschiedenen Energien. Diese werden dann mit der klassischen Version verglichen.

5.1 Theorie

Die Funktion für das Energiepotential $V(x)$, die Eigenfunktion des Systems $\psi(x)$, die Eigenenergie E_n und die Wahrscheinlichkeitsdichte eines klassischen Teilchens $P_{kl}(x)$ werden gesucht.

5.1.1 Energiepotential

Das Hook'sche Gesetz ist definiert als:

$$F = -kx, \quad \text{wobei } k \text{ die Federkonstante ist.} \quad (18)$$

Die Kraft wird als der räumliche Gradient des Potentials beschrieben:

$$F = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \quad (19)$$

Das Hook'sche Gesetz (18) wird in (19) für F eingesetzt:

$$\begin{aligned} -kx &= -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \\ kx &= \frac{\partial V(x)}{\partial x} \\ kx \partial x &= \partial V(x) \\ \int kx \partial x &= \int \partial V(x) \\ V(x) &= \frac{1}{2} kx^2 \end{aligned} \quad (20)$$

Die Gleichung (20) beschreibt das Potential eines klassischen harmonischen Oszillators.

Es ist bekannt, dass die Schwingungsfrequenz ω durch folgenden Zusammenhang gegeben ist:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \text{wobei } \omega \text{ die Schwingungsfrequenz ist} \quad (21)$$

Denn es wird angenommen, dass die Masse $m = 1$ ist, ergibt sich folgende Umformung von (??) ¹⁸:

$$V(x) = \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \quad (22)$$

Diese Formel (22) wird in dem Python-Programm verwendet.

5.1.2 Eigenfunktion des harmonischen Oszillators

Umformung der Schrödinger-Gleichung

Um den Ausdruck für das Potential (20) der klassischen Mechanik in die Quantenmechanik zu übertragen, muss die Positionsvariable x in einen Operator umgewandelt werden.

$$V(\hat{x}) = \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \quad (23)$$

¹⁸Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 1: The Classical Harmonic Oscillator* (Stand: 12.11.2021). https://youtu.be/yG_0t9rsNaw?si=b9RfxPGyzmFjEOWw. [7.9.2023].

Der Operator für das Potential wird dann in die Schrödinger-Gleichung (7) eingesetzt.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \psi(x) &= E \psi(x) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left(E - \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \right) \psi(x) &= 0 \\ \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \right) \psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung wird die folgende Definition eingeführt:

$$\gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \quad (24)$$

Diese wird in die obige Gleichung eingesetzt:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \gamma E \psi(x) - \gamma \frac{k}{2} \hat{x}^2 \psi(x) = 0 \quad (25)$$

Das Ziel ist nun, (25) in die folgende Form zu überführen, um die Gleichung lösbar zu machen.

$$\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} + \varepsilon \psi(X) - X^2 \psi(X) = 0 \quad \text{wobei } X = x/\alpha \quad (26)$$

Dabei sind ε und α neue Konstanten, die noch gefunden werden müssen. Zunächst wird $\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$ aus (25) in $\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2}$ aus (26) umgewandelt.

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} \psi(x)$$

Dazu wird die Definition $X = x/\alpha$ aus (26) eingesetzt.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) &= \frac{\partial(x/\alpha)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial X} \psi(X) \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(X) &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi(X) \end{aligned} \quad (27)$$

$\frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi(X)$ aus (27) ersetzt $\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$ aus (25).

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi(X) + \gamma E \psi(X) - \gamma \frac{k}{2} \alpha^2 X^2 \psi(X) &= 0 \\ \alpha^2 \left(\frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi(X) + \gamma E \psi(X) - \gamma \frac{k}{2} \alpha^2 X^2 \psi(X) = 0 \right) \\ \frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi(X) + \gamma E \alpha^2 \psi(X) - \gamma \frac{k}{2} \alpha^4 X^2 \psi(X) &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

Da das Ziel ist, dass die obige Gleichung (28) die Form $\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} + \varepsilon \psi(X) - X^2 \psi(X) = 0$ (26) hat, muss $\gamma \frac{k}{2} \alpha^4$ noch entfernt werden. Dies kann erreicht werden, indem man folgende Definition einführt:

$$\gamma \frac{k}{2} \alpha^4 = 1 \quad (29)$$

Dadurch kann auch α herausgefunden werden:

$$\alpha = \left(\frac{2}{k\gamma} \right)^{1/4} \quad (30)$$

$\gamma E a^2$ aus (28) muss ebenfalls in ε umgewandelt werden. Man kann die folgende Definition einführen:

$$\varepsilon = \gamma E \alpha^2 \quad (31)$$

Wenn die Gleichungen (29) und (31) wieder in (28) eingesetzt werden, erhält man:

$$\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} + \varepsilon \psi(X) - X^2 \psi(X) = 0 \quad (32)$$

Diese Form der Gleichung ist genau das Ziel (vgl. Gl. (26)), denn sie ist lösbar. Sie wird umgeschrieben in:

$$\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} + (\varepsilon - X^2) \psi(X) = 0 \quad (33)$$

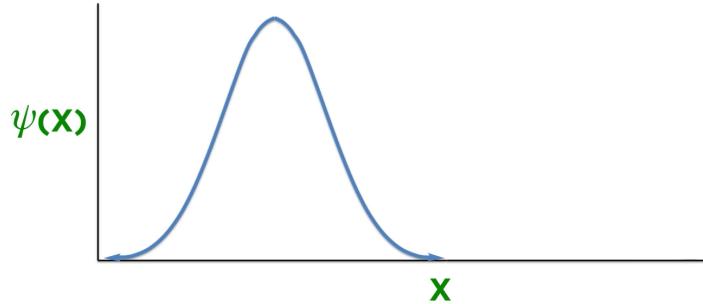


Abbildung 9: Die Wellenfunktion eines lokalisierten gaußschen Wellenpakets nähert sich null, wenn sich die Position X weit vom Zentrum des Wellenpakets entfernt. Quelle: Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 2: Solving the Schrödinger Equation* bei 10:52.
<https://www.youtube.com/watch?v=129vbExLSak> [3.10.2023]

Bestimmung der Eigenfunktion

Um die Wellenfunktion $\psi(X)$ zu finden, kann man zuerst den Bereich der Wellenfunktion betrachten, wenn X gegen unendlich geht. Dabei nimmt man an, dass $X \gg \varepsilon$. Unter dieser Annahme ist ε vernachlässigbar, und man erhält die folgende Gleichung:

$$\frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} - X^2 \psi(X) = 0$$

Die allgemeine Lösung dieser Differenzialgleichung ist:

$$\psi(X) = ae^{-X^2/2} + be^{X^2/2}$$

Wenn X gegen unendlich geht, geht die Wellenfunktion $\psi(X)$ gegen null (Vgl. Abb. 9). Deswegen kann $be^{X^2/2}$ nicht Teil der Gleichung sein, weil der positive Exponent bedeutet, dass das Wellenpaket ins Unendliche wachsen würde. Die Wellenfunktion wäre nicht normalisierbar. Wenn man $be^{X^2/2}$ vernachlässigt, erhält man:

$$\psi(X) = ae^{-x^2/2}, \quad \text{wenn } X >> \varepsilon$$

Jedoch muss die Konstante a durch $g(X)$ ersetzt werden, um die Glockenform des Wellenpakets zu repräsentieren, wenn X klein ist (Vgl. Abb. 9). Deshalb:

$$\psi(X) = g(X)e^{-x^2/2} \quad (34)$$

Die obige Definition von $\psi(X)$ (34) kann wieder in (32) eingesetzt werden. Somit erhält man:

$$\frac{\partial^2 [g(X)e^{-x^2/2}]}{\partial X^2} + (\varepsilon - X^2) g(X)e^{-x^2/2} = 0 \quad (35)$$

Die obige Gleichung (35) wird nun gelöst. Zuerst wird der erste Teil $\frac{\partial^2 [g(X)e^{-x^2/2}]}{\partial X^2}$ erweitert.

Die erste Ableitung von $\frac{\partial [g(X)e^{-x^2/2}]}{\partial X}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial [g(X)e^{-x^2/2}]}{\partial X} &= \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} + g(X) \frac{\partial (e^{-x^2/2})}{\partial X} \\ &= \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} + g(X) \frac{-2X}{2} \frac{\partial (e^{-x^2/2})}{\partial X} = \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} - g(X) X e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

Die zweite Ableitung von $\frac{\partial [g(X)e^{-x^2/2}]}{\partial X}$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} - g(X) X e^{-x^2/2} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} \right) - \frac{\partial}{\partial X} \left(g(X) X e^{-x^2/2} \right) \end{aligned} \quad (36)$$

Der erste Summand $\frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} \right)$ der zweiten Ableitung (36) wird erweitert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} \right) &= \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} + \frac{\partial g(X)}{\partial X} \frac{\partial}{\partial X} e^{-x^2/2} \\ &= \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} e^{-x^2/2} - X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} \end{aligned} \quad (37)$$

Der zweite Summand $- \frac{\partial}{\partial X} \left(g(X) X e^{-x^2/2} \right)$ der zweiten Ableitung (36) wird ebenfalls erweitert:

$$\begin{aligned} - \frac{\partial}{\partial X} \left(g(X) X e^{-x^2/2} \right) &= - \left(\frac{\partial g(X)}{\partial X} X e^{-x^2/2} + g(X) \frac{\partial (X)}{\partial X} e^{-x^2/2} + g(X) X \frac{\partial (e^{-x^2/2})}{\partial X} \right) \\ &= - X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} - g(X) e^{-x^2/2} + X^2 g(X) e^{-x^2/2} \end{aligned} \quad (38)$$

Die erweiterten Summanden (37) und (38) werden summiert.

$$\frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} e^{-x^2/2} - X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} - X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-x^2/2} - g(X) e^{-x^2/2} + X^2 g(X) e^{-x^2/2}$$

$$= \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} e^{-X^2/2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-X^2/2} - g(X) e^{-X^2/2} + X^2 g(X) e^{-X^2/2} \quad (39)$$

Die obige Gleichung (39) wird wieder in (35) eingesetzt und vereinfacht.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} e^{-X^2/2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} e^{-X^2/2} - g(X) e^{-X^2/2} + X^2 g(X) e^{-X^2/2} + (\varepsilon - X^2) g(X) e^{-X^2/2} &= 0 \\ \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} - g(X) + X^2 g(X) + (\varepsilon - X^2) g(X) &= 0 \\ \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} - g(X) + X^2 g(X) + \varepsilon g(X) - X^2 g(X) &= 0 \\ \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} - g(X) + \varepsilon g(X) &= 0 \\ \frac{\partial^2 g(X)}{\partial X^2} - 2X \frac{\partial g(X)}{\partial X} + (\varepsilon - 1) g(X) &= 0 \\ g(X)'' - 2X g(X)' + (\varepsilon - 1) g(X) &= 0 \end{aligned} \quad (40)$$

Die homogene lineare Differentialgleichung (40) nimmt die Form einer hermiteschen Differentialgleichung an:

$$w'' - 2wz' + \lambda w = 0, \quad \text{wobei: } w = g(X), \quad z = X, \quad \lambda = \varepsilon - 1$$

Die Lösungen einer hermiteschen Differenzialgleichung sind die Hermites-Polynome $H_n(X)$:

$$g(X) = H_n(X) = (-1)^n e^{X^2} \frac{\partial}{\partial X^n} e^{-X^2} \quad (41)$$

Beispielsweise kann das Hermites-Polynom für die Wellenfunktion beim Grundzustand $n = 0$ folgenderweise ausgewertet werden:

$$H_0(X) = (-1)^0 e^{X^2} \frac{\partial}{\partial X^0} e^{-X^2} = 1 e^{X^2} e^{-X^2} = 1(1) = 1 \quad (42)$$

Denn $\psi(X) = g(X) e^{-X^2/2}$ (34) und $g(X) = H_n(X)$ (41), ergibt sich:

$$\psi(X) = H_n(X) e^{-X^2/2} \quad (43)$$

Normalisierung der Eigenfunktion

Abschließend wird der Normalisierungsfaktor bestimmt, um sicherzustellen, dass das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion den Wert 1 annimmt.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(X) \psi(X) dX = 1$$

Hier wird beispielhaft nur der Normalisierungsfaktor für den Grundzustand betrachtet, wobei $H_0(X) = 1$ (vgl. Gl. (42)).

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_0(X) e^{-X^2/2}^* (X) H_0(X) e^{-X^2/2} dX = \int_{-\infty}^{\infty} [1 e^{-X^2/2}]^* [1 e^{-X^2/2}] dX = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-X^2} dX = \sqrt{\pi}$$

Um die normalisierte Wellenfunktion zu erhalten, muss die nicht normalisierte Funktion mit $\frac{1}{\sqrt{N}}$ multipliziert werden, wobei N der Normalisierungsfaktor ist (vgl. Gl. (41)). Somit ergibt sich die normalisierte Wellenfunktion für den Grundzustand $n = 0$:

$$\psi_0(X) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} [H_0(X)e^{-X^2/2}] = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-X^2/2} \quad (44)$$

Die allgemeine Wellenfunktion für den quantenharmonischen Oszillator ist zu umfangreich und aufwendig, um hier hergeleitet zu werden, da sie komplexe Fakultäten enthält. Die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung mit dem Potential eines harmonischen Oszillators lautet:

$$\psi_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/4}}} H_n(X) e^{-X^2/2} \quad (45)$$

Dabei repräsentiert n das Energieniveau oder Quantenzahl, das eine ganze Zahl sein muss.¹⁹

5.1.3 Eigenenergien

Es ist bekannt aus Gleichung (44), dass $\psi_0(X) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-X^2/2}$. Dieser Ausdruck wird in die Schrödinger-Gleichung von Gleichung (32) eingesetzt.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi(X)}{\partial X^2} + \varepsilon \psi(X) - X^2 \psi(X) &= 0 \\ \frac{1}{\pi^{1/4}} \left(\frac{\partial^2 e^{-X^2/2}}{\partial X^2} + \varepsilon_0 e^{-X^2/2} - X^2 e^{-X^2/2} \right) &= 0 \\ \frac{\partial^2 e^{-X^2/2}}{\partial X^2} + \varepsilon_0 e^{-X^2/2} - X^2 e^{-X^2/2} &= 0 \end{aligned} \quad (46)$$

Zuerst wird $\frac{\partial^2 e^{-X^2/2}}{\partial X^2}$ gefunden. Die erste Ableitung dieses Ausdrucks lautet:

$$\frac{\partial e^{-X^2/2}}{\partial X} = (-2X/2)e^{-X^2/2} = -Xe^{-X^2/2}$$

Und die zweite Ableitung:

$$\frac{\partial(-Xe^{-X^2/2})}{\partial X} = \frac{\partial(-X)}{\partial X} e^{-X^2/2} + (-X) \frac{\partial e^{-X^2/2}}{\partial X} = -e^{-X^2/2} + X^2 e^{-X^2/2} \quad (47)$$

Die zweite Ableitung (47) wird in (46) eingesetzt.

$$\begin{aligned} -e^{-X^2/2} + X^2 e^{-X^2/2} + \varepsilon_0 e^{-X^2/2} - X^2 e^{-X^2/2} &= 0 \\ e^{-X^2/2}(-1 + X^2 + \varepsilon_0 - X^2) &= 0 \\ \varepsilon_0 - 1 &= 0 \\ \varepsilon_0 &= 1 \end{aligned} \quad (48)$$

¹⁹Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 2: Solving the Schrödinger Equation* (Stand: 26.11.2021). <https://youtu.be/l29vbExLSak?si=vT5PetSxxp3JvRzS>. [7.9.2023].

Es ist bekannt aus Gleichung (31), dass $\varepsilon = \gamma E \alpha^2$ und aus Gleichung (30), dass $a = \left(\frac{2}{k\gamma}\right)^{1/4}$. Diese Ausdrücke werden in Gleichung (48) eingesetzt. Dadurch ergibt sich:

$$\frac{2m}{\hbar^2} E_0 \left(\frac{2}{k\gamma}\right)^{1/2} = 1$$

Es ist ebenfalls bekannt aus Gleichung (24), dass $\gamma = \frac{2m}{\hbar^2}$. Dieser Ausdruck wird in die obige Gleichung eingesetzt.

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} E_0 \left(\frac{2\hbar^2}{k2m}\right)^{1/2} &= \frac{2m\hbar}{\hbar^2} E_0 \left(\frac{1}{km}\right)^{1/2} = \frac{2m}{\hbar} E_0 \left(\frac{1}{km}\right)^{1/2} = \frac{2}{\hbar} E_0 \left(\frac{m^2}{km}\right)^{1/2} \\ &= \frac{2}{\hbar} E_0 \left(\frac{m}{k}\right)^{1/2} = 1 \end{aligned} \quad (49)$$

Von Gleichung (49) wird E_0 gelöst:

$$E_0 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Da $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ (21), kann E_0 so ausgedrückt werden:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (50)$$

Gleichung(50) ist der Ausdruck für die Eigenenergie eines Teilchens im Grundzustand. Für Teilchen mit höheren Energieniveaus gilt die folgende Gleichung:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (51)$$

Dabei repräsentiert n das Energieniveau oder Quantenzahl, das eine ganze Zahl sein muss.²⁰

5.1.4 Aufenthaltswahrscheinlichkeit des klassischen harmonischen Oszillators

Es wird nach der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines klassischen Teilchens gesucht, das von einer Seite des harmonischen Oszillators zur anderen schwingt. Dabei variiert die Geschwindigkeit des Teilchens. Am tiefsten Punkt des Potentials erreicht es seine maximale Geschwindigkeit, während sie an den Wendepunkten null ist (vgl. Abb. 10). Folglich verbringt das Teilchen mehr Zeit an den Wendepunkten als im Tal des Potentials.

Daher ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an den Wendepunkten zu finden, höher. Dies lässt sich mathematisch ausdrücken:

$$P_{cl}(x)dx = \frac{2dt}{T} \quad (52)$$

Dieser Ausdruck gibt den Anteil der Zeit dt der Periode T an, den das Teilchen innerhalb des Intervalls dx verbringt. $P_{kl}(x)$ ist die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens.

²⁰Dudik, Rachel: *The Quantum Harmonic Oscillator* (Stand: 5.4.2004).

http://physics.gmu.edu/~dmaria/590%20Web%20Page/public_html/qm_topics/harmonic/. [7.9.2023].

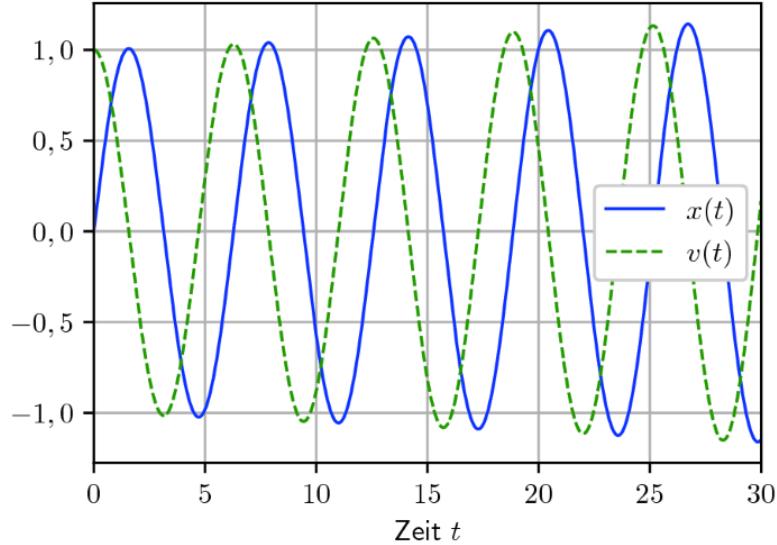


Abbildung 10: Die Funktionen $x(t)$ und $v(t)$ eines klassischen harmonischen Oszillators sind sinus- bzw. cosinusförmig. Quelle: Gerlach, Stephan: *Der Oszillator*. https://doi.org/10.1007/978-3-662-59246-5_13[3.10.2023].

$$v = \frac{dx}{dt} \Rightarrow dt = \frac{dx}{v} \quad (53)$$

Der Ausdruck für dt aus Gleichung (53) wird in Gleichung (52) eingesetzt.

$$\begin{aligned} P_{kl}(x)dx &= \frac{2dx}{vT} \\ P_{kl}(x) &= \frac{2}{vT} \end{aligned} \quad (54)$$

Anschließend wird die Geschwindigkeit v in Bezug auf x ausgedrückt. Dies geschieht mithilfe der Energieerhaltung, wobei K für die kinetische Energie und V für die potentielle Energie steht.

$$E = T + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (55)$$

Zunächst wird der Ausdruck für x_{wp} , die Wendepunkte, gesucht. An den Wendepunkten x_{wp} gilt $v = 0$. Daher ergibt sich:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}m0^2 + \frac{1}{2}kx_{wp}^2 = \frac{1}{2}kx_{wp}^2 \\ x_{wp} &= \sqrt{\frac{2E}{k}} \end{aligned} \quad (56)$$

Die Geschwindigkeit v wird ebenfalls mithilfe der Energieerhaltung (55) ermittelt.

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \\ E - \frac{1}{2}kx^2 &= \frac{1}{2}mv^2 \\ \frac{2}{m} \left(E - \frac{1}{2}kx^2 \right) &= v^2 \\ v^2 &= \frac{2E}{m} - \frac{k}{m}x^2 \end{aligned}$$

Da $\omega = \sqrt{k/m}$ (vgl. (21)):

$$v^2 = \frac{2E}{m} - \omega^2 x^2 \quad (57)$$

Um die Wendepunkte x_{wp} in Gleichung(57) einzusetzen, wird Gleichung(57) wie folgt umgeformt:

$$\begin{aligned} v^2 &= \frac{k}{m} \frac{2E}{k} - \omega^2 x^2 = \omega^2 \frac{2E}{k} - \omega^2 x^2 = \omega^2 x_{wp}^2 - \omega^2 x^2 = \omega^2 (x_{wp}^2 - x^2) \\ v &= \omega \sqrt{(x_{wp}^2 - x^2)} \end{aligned} \quad (58)$$

Daraus ergibt sich der Ausdruck für v in Abhängigkeit von x (Gleichung (58)). Dieser wird wiederum in Gleichung (54) eingesetzt.

$$P_{kl}(x) = \frac{2}{T\omega \sqrt{(x_{wp}^2 - x^2)}}$$

Da $T = \frac{2\pi}{\omega}$,

$$P_{kl}(x) = \frac{2\omega}{2\pi\omega \sqrt{(x_{max}^2 - x^2)}} = \frac{1}{\pi} \sqrt{(x_{max}^2 - x^2)}$$

und $x_{max} = \sqrt{\frac{2E}{k}}$ (Gleichung (56)),

$$P_{kl}(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2E}{k} - x^2} \quad (59)$$

ist Gleichung (59) die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines klassischen Teilchens.²¹

²¹Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 3: Interpretation and Application* (Stand: 10.12.2021). <https://www.youtube.com/watch?v=ocB9V8Dnb3o&t=911s>. [7.9.2023].

5.2 Simulation und Resultate

5.2.1 Simulation

Ein Quantenobjekt im harmonischen Oszillatator wird in der Simulation von Energieniveau $n = 0$ bis $n = 11$ betrachtet. Dabei wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion $P(x)$ mit derjenigen eines klassischen Teilchens $P_{kl}(x)$ verglichen, das über die gleiche Energie verfügt. Die entsprechenden theoretischen Zusammenhänge sind bekannt und werden in das Programm implementiert.

```
def harmonisches_potential(w, x):
    # Harmonisches Potenzial mit der Kreisfrequenz w- für den harmonischen Oszillatator
    return (w * x) ** 2 / 2
```

Abbildung 11: Die Funktion für das Potential: $V(x) = \frac{1}{2}w^2x^2$ (vgl. Gleichung (22))

```
def eigenzustand_oscillator(w, n, x):
    # Eigenzustand des quantenharmonischen Oszillators mit der Kreisfrequenz w und der Energie n.
    def hermite(x, n):
        x1 = np.sqrt(m * w / hbar) * x
        herm_coeffs = np.zeros(n + 1)
        herm_coeffs[n] = 1
        return Herm.hermval(x1, herm_coeffs)

    xi = np.sqrt(m * w / hbar) * x
    prefactor = 1. / math.sqrt(2. ** n * math.factorial(n) * (m * w / (np.pi * hbar)) ** 0.25
    psi = prefactor * np.exp(- xi ** 2 / 2) * hermite(x, n)
    return psi
```

Abbildung 12: Die Funktion zur Berechnung der Eigenfunktionen: $\psi_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/4}}} H_n(X) e^{-x^2/2}$ (vgl. Gleichung (45))

```
psi0 = eigenzustand_oscillator(w=1, n=1, x=x)      # Ausgangswellenfunktion
V = harmonisches_potential(x=x)      # Potential
```

Abbildung 13: Die Eigenfunktion und das harmonische Potential werden als Parameter eingegeben.

Da die Eigenfunktion als Ausgangswellenfunktion gegeben ist (siehe Abb. 13), würde die Wellenfunktion und somit ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion stationär bleiben.

Des Weiteren muss die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines klassischen Teilchens im harmonischen Oszillatator, das dasselbe Energieniveau n besitzt wie das Quantenobjekt, dargestellt werden. Die folgenden Zusammenhänge sind bekannt:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (51), \quad P_{kl}(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2E}{k} - x^2} \quad (59)$$

Sie werden im Programm verwendet:

```

def klassisch(x, n):
    E = hbar * w * (n + 0.5)
    x_max = numpy.sqrt(2 * E / (m * w ** 2))
    P_klassisch = numpy.zeros(x.shape[0])
    x_inside = abs(x) < (x_max - 0.025)
    P_klassisch[x_inside] = 1. / numpy.pi / numpy.sqrt(x_max ** 2 - x[x_inside] * x[x_inside])
    return P_klassisch

```

Abbildung 14: Funktion zur Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines klassischen Teilchen im harmonischen Oszillators, das die gleiche Energie besitzt, wie das Quantenobjekt.

5.2.2 Resultate

Die orangefarbene Linie repräsentiert die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion $P_{kl}(x)$, während die blaue Linie die Eigenfunktion $P_\psi(x)$ darstellt. Es wurde beobachtet, dass mit steigendem Energieniveau die Eigenfunktion sich weiter von der Mitte des Oszillators ausdehnt und die Wellenlänge der Eigenfunktion kürzer wird. Zusätzlich ähnelt die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit zunehmendem Energieniveau immer mehr der klassischen.

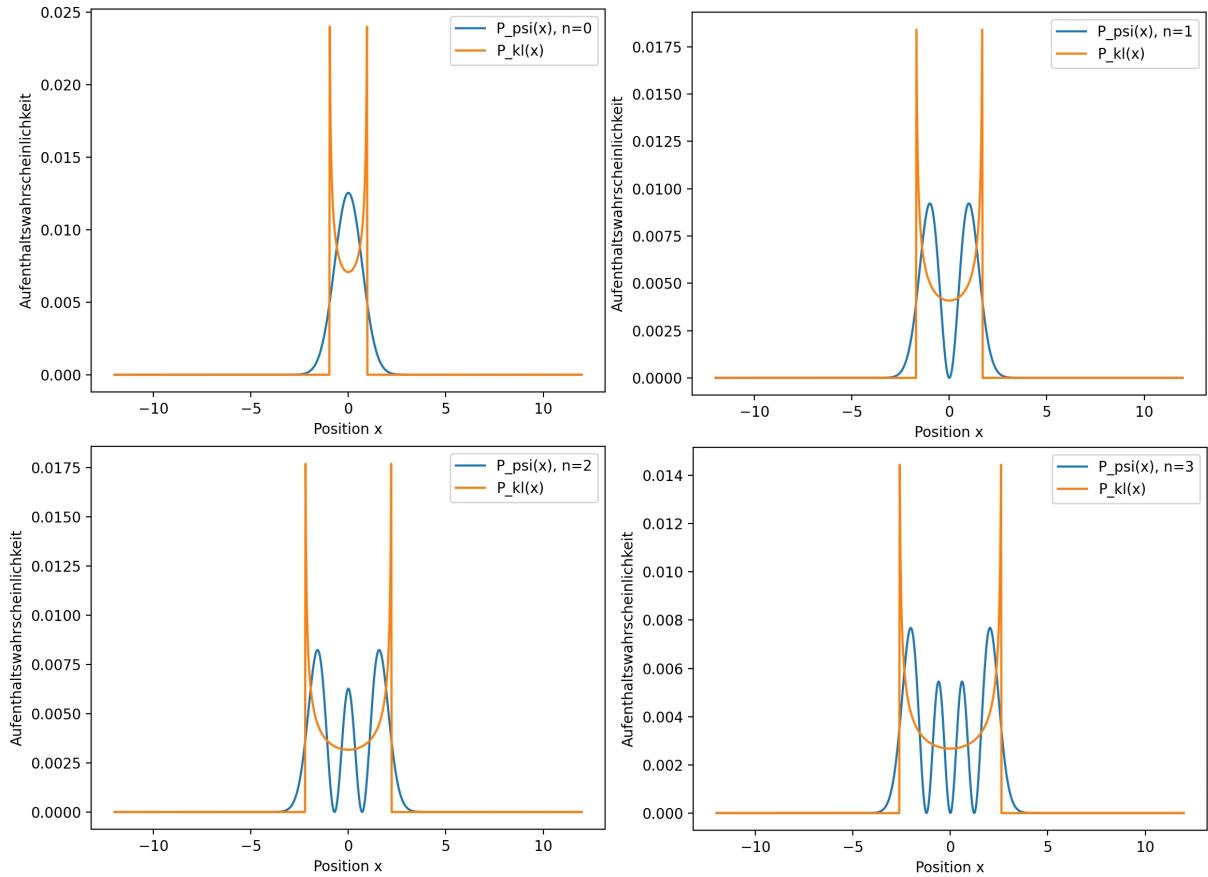


Abbildung 15: Die klassische und quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines Teilchens für $n = 0$ bis 3.

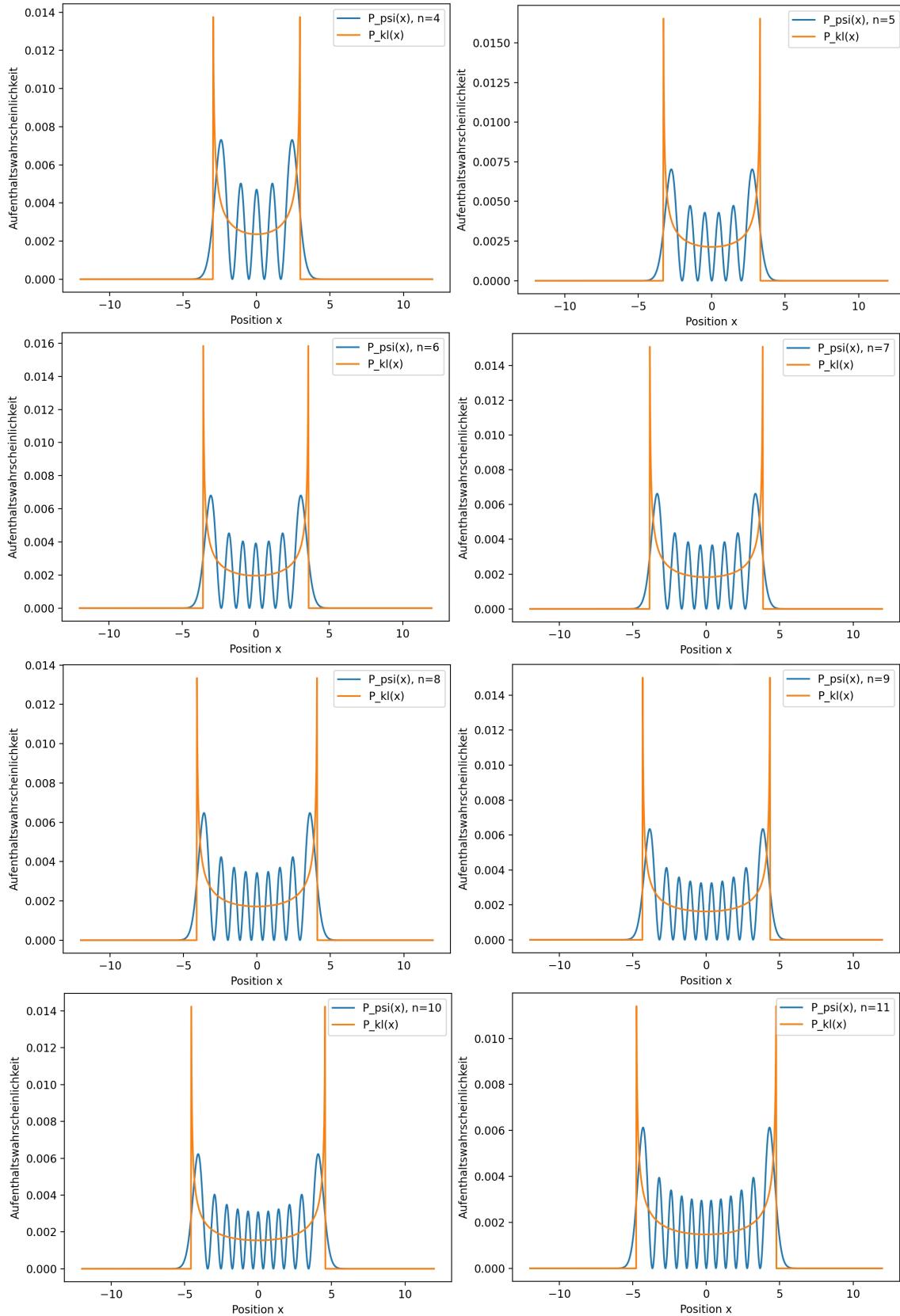


Abbildung 16: Die klassische und quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion eines Teilchens für $n = 4$ bis 11.

5.3 Interpretation

5.3.1 Grundzustand

Die klassische und quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichten beim Grundzustand weisen entgegengesetzte Charakteristika auf. Im klassischen Fall konzentriert sich die Wahrscheinlichkeitsdichte an den Wendepunkten, während im quantenmechanischen Fall die Wahrscheinlichkeitsdichte sich im Zentrum des Oszillators konzentriert (vgl. Abb. 17). Dies verdeutlicht den fundamentalen Unterschied zwischen klassischer und quantenmechanischer Physik.²²

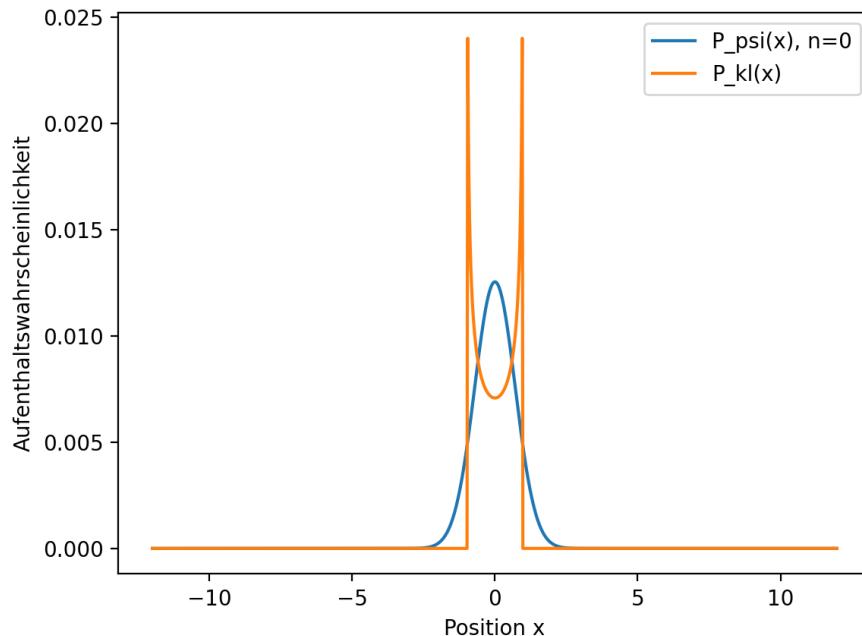


Abbildung 17: Die klassischen (orangefarbenen) und quantenmechanischen (blauen) Aufenthaltswahrscheinlichkeiten eines Teilchens im Grundzustand ($n = 0$) erreichen ihr Maximum an den Wendepunkten bzw. im Zentrum des Oszillators.

5.3.2 Die klassische Grenze

In meiner Untersuchung habe ich auch beobachtet, dass mit zunehmender Quantenzahl n die Wahrscheinlichkeitsdichte des quantenmechanischen Oszillators derjenigen des klassischen Oszillators immer ähnlicher wird.

Wenn die Quantenzahl n erhöht wird, nimmt die Energie des quantenmechanischen Oszillators zu, und der Impuls des Teilchens ebenfalls. Dadurch verkürzt sich die Wellenlänge der Eigenfunktion. Das Verkürzen der Wellenlänge lässt sich durch das Verhältnis von De-Broglie-Wellenlänge zu Impuls verdeutlichen: $\lambda = \frac{h}{p}$ (wobei λ die Wellenlänge, h die Plancksche Konstante und p der Impuls ist). Dies zeigt, dass die Wellenlänge λ eines Teilchens invers proportional zu seinem Impuls p ist²³. Mit der Erhöhung der Quantenzahl n wird der Impuls des Wellenpakets höher und seine Wellenlänge folglich kürzer. Die

²²LibreTexts: *The Harmonic Oscillator Energy Levels* (Stand: o.D.).

[https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_Georgia/CHEM_3212/03%3A_Quantum_Review/3.2%3A_The_Harmonic_Oscillator_and_the_Rigid_Rotor/3.2.04%3A_The_Harmonic_Oscillator_Energy_Levels\[7.9.2023\].](https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_Georgia/CHEM_3212/03%3A_Quantum_Review/3.2%3A_The_Harmonic_Oscillator_and_the_Rigid_Rotor/3.2.04%3A_The_Harmonic_Oscillator_Energy_Levels[7.9.2023].)

²³Wikipedia-Autoren: *Materiewelle* (Stand: 17.9.2023). <https://de.wikipedia.org/wiki/Materiewelle>. [4.10.2023].

immer kürzer werdende Wellenlänge der Wahrscheinlichkeitsdichte nähert sich der Längenskala des klassischen Oszillators an. Die verkürzte Wellenlänge führt auch dazu, dass die räumliche Ausdehnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung um die Maxima (in diesem Fall um die Wendepunkte) herum kleiner wird, was zu einer höheren räumlichen Konzentration um die Maxima führt. Daher ähnelt das Verhalten des quantenmechanischen Oszillators immer mehr dem eines klassischen Oszillators auf makroskopischer Ebene.

Dieser Übergang zur klassischen Grenze kann als eine Art 'Entquantisierung' verstanden werden, bei der die quantenmechanischen Effekte allmählich weniger dominant werden und das Verhalten des Oszillators sich den klassischen Erwartungen annähert. Dies bedeutet jedoch nicht, dass die Quantenmechanik keine Rolle mehr spielt, sondern vielmehr, dass bei höheren Energiezuständen die Unterschiede zwischen quantenmechanischem und klassischem Verhalten subtiler werden. Die Grenze zwischen klassischer Physik und Quantenphysik ist jedoch unscharf. In einem Experiment von Markus Arndt und Anton Zeilinger²⁴ wurde beobachtet, dass Moleküle aus 70 Atomen Interferenzen von de-Broglie-Wellen aufweisen. Es ist jedoch technisch schwierig, Welleneigenschaften von noch größeren Teilchen nachzuweisen, da ihre Wellenlängen aufgrund der de-Broglie-Relation sehr klein und schwer experimentell nachzuweisen sind. 'Die Frage, bis zu welcher Objektgröße Quanteninterferenz gesehen werden kann, bleibt also noch lange eine spannende Herausforderung an die Fantasie und das Geschick der Experimentalphysiker.' (Arndt & Zeilinger, 2000, S. 71)

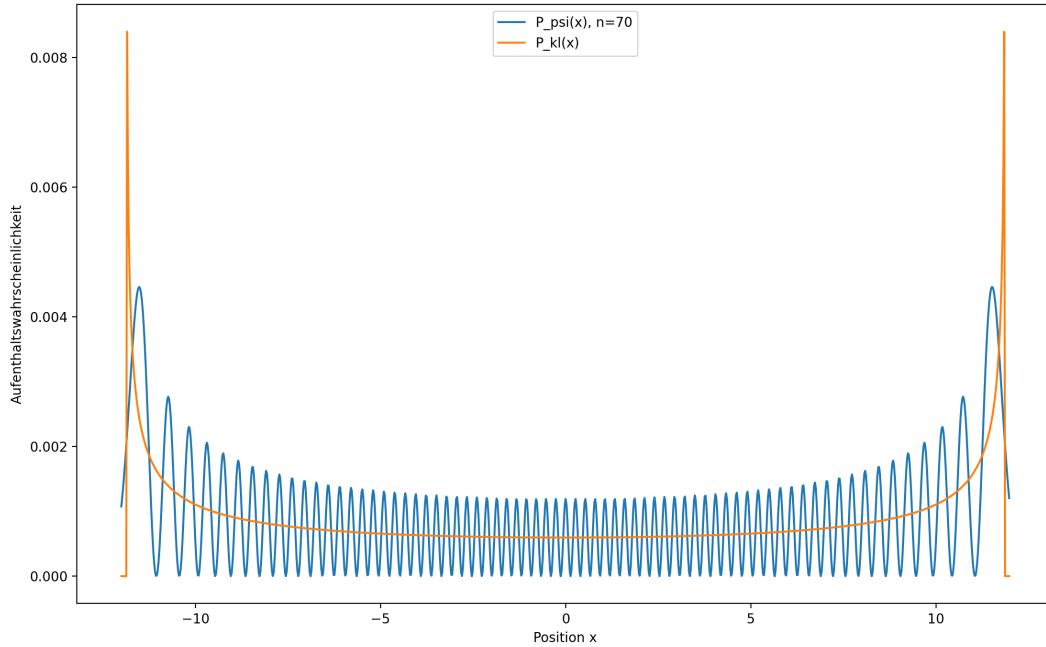


Abbildung 18: Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens (blau) bei Energieniveau $n = 70$ hat aufgrund seines hohen Impulses eine kurze de-Broglie-Wellenlänge und ähnelt der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit (orange).

²⁴M. Arndt & A. Zeilinger: *Wo ist die Grenze der Quantenwelt?* In: Im Blickpunkt. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/phb1.20000560316>. [3.10.2023]

5.3.3 Symmetrie

Es fällt auf, dass mit steigender Quantenzahl n die Wahrscheinlichkeitsdichte zwischen einem lokalen Maximum und null oszilliert. Besonders interessant ist, dass für gerade n ein Maximum im Zentrum existiert, während bei ungeradem n die Wahrscheinlichkeitsdichte null wird. Bei geradem n zeigt die Wellenfunktion ψ eine Symmetrie entlang der Positionsachse (siehe Abb. 19). Dadurch erreicht die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $|\psi|^2$ im Zentrum des Oszillators ein lokales Maximum (siehe Abb. 20). Für ungerade n hingegen ist die Wellenfunktion ψ entlang der Positionsachse antisymmetrisch (siehe Abb. 19). Bei $x = 0$ erfolgt eine Punktspiegelung, wodurch $\psi = 0$ wird. Daher besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $|\psi|^2$ bei ungerader Quantenzahl stets eine Nullstelle im Zentrum des Oszillators, also bei $x = 0$ (siehe Abb. 20). Dieser Wechsel der Symmetrie mit der Quantenzahl n und die daraus resultierenden Veränderungen in der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion sind typisch für quantenmechanische Systeme.²⁵

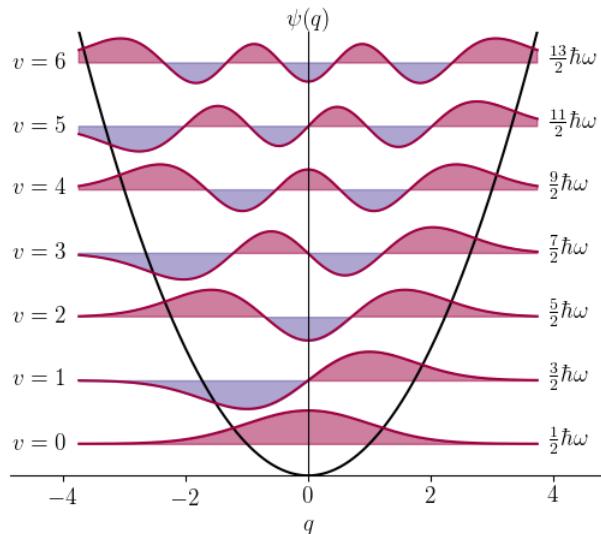


Abbildung 19: Wellenfunktionen mit einer geraden Quantenzahl (hier v) sind entlang der Positionsachse (hier q) symmetrisch und haben im Zentrum des Oszillators stets einen nicht-nullden Wert.

Wellenfunktionen mit einer ungeraden Quantenzahl sind entlang der Positionsachse antisymmetrisch und haben im Zentrum des Oszillators (hier $q = 0$) stets eine Nullstelle. Quelle: Christian: *The harmonic oscillator wavefunctions*. <https://scipython.com/static/media/uploads/blog/sho/sho-psi1-6.png>. [3.10.2023].

²⁵Wikipedia-Autoren: *Parität (Physik)* (Stand: 12.2.2023). [https://de.wikipedia.org/wiki/Parit%C3%A4t_\(Physik\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Parit%C3%A4t_(Physik)). [3.10.2023].

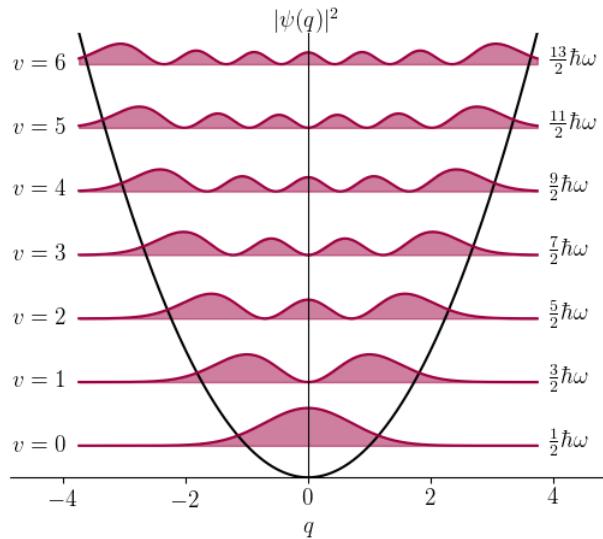


Abbildung 20: Die Wahrscheinlichkeitsdichten von Wellenfunktionen mit einer geraden Quantenzahl (hier v) haben im Zentrum des Oszillators stets ein lokales Maximum. Hingegen sind Wahrscheinlichkeitsdichten von Wellenfunktionen mit einer ungeraden Quantenzahl im Zentrum des Oszillators ($q = 0$) stets null. Quelle: Christian: *The harmonic oscillator wavefunctions*.
<https://scipython.com/static/media/uploads/blog/sho/sho-psi2-6.png>. [3.10.2023].

5.3.4 Überschreitung der Wendepunkte

Es ist von besonderer Bedeutung, das Verhalten der Wahrscheinlichkeitsdichte in Bezug auf die Wendepunkte des Oszillators zu betrachten. Dabei ist mir aufgefallen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte für alle Energieniveaus n über die klassischen Wendepunkte hinausreicht. Dies zeigt, dass aufgrund der Wellennatur der Teilchen die Wahrscheinlichkeit, sie außerhalb dieser klassischen Begrenzungen anzutreffen, nicht null ist. Dieses faszinierende Phänomen wird als Tunneleffekt bezeichnet. Mit steigender Energie des Teilchens nimmt die Wahrscheinlichkeit zu, diesen Effekt zu beobachten.²⁶

²⁶Rioux, Frank: *The Quantum Harmonic Oscillator* (Stand: o.D.).
<https://faculty.csbsju.edu/frioux/sho/QuantumOscillator.pdf>. [4.10.2023].

6 Modell 3: Potentialbarriere

In der klassischen Physik würden Teilchen, die auf eine hohe Energiebarriere treffen, von dieser abprallen oder nicht in der Lage sein, sie zu überwinden. Die Quantenmechanik hingegen eröffnet uns eine erstaunliche Einsicht: Teilchen können durch Energiebarrieren 'durchtunneln', selbst wenn sie nach klassischen Gesetzen nicht genügend Energie hätten, um diese Barriere zu überwinden. Die Quantenmechanik erlaubt dem Teilchen, durch die Barriere zu 'tunneln', indem es seine Wellenfunktion überlappt und die Wahrscheinlichkeit, auf der anderen Seite zu erscheinen, nicht null ist. Dieses Phänomen heißt der Tunneleffekt.

In meiner Untersuchung stelle ich mir die Frage, wie das Verhältnis der Energie des Teilchens E zur Energie der Barriere V_0 die Wahrscheinlichkeit des Tunneleffekts beeinflusst. Meine Hypothese lautet, dass Teilchen in der Regel eine höhere Chance haben, durch die Barriere zu tunneln, je höher ihre Energie ist. Jedoch vermute ich auch, dass bestimmte Resonanzen der Wellen eine wichtige Rolle spielen. Wenn das $E : V_0$ -Verhältnis genau passt, könnte die de-Broglie-Wellenlänge des Teilchens mit der Energie der Barriere resonieren, was zu einer höheren Chance des Tunneleffekts führen könnte.

Im theoretischen Abschnitt wird der Transmissionsfaktor hergeleitet, der die Wahrscheinlichkeit des Tunnelns quantifiziert. Die Bedingungen für Resonanz werden ebenfalls hergeleitet. Anhand der hergeleiteten Gleichung für den Transmissionsfaktor berechnet das Computerprogramm die theoretischen Transmissionsfaktoren für Teilchen mit verschiedenen Energien E . Anschließend werden Teilchen mit unterschiedlichen Energien E durch eine Potenzialbarriere simuliert. Die Transmission aus der Simulation sollte den berechneten Transmissionsfaktoren entsprechen. Außerdem sollte die Transmission einen Höhepunkt erreichen, wenn die Bedingungen für Resonanz erfüllt sind. Durch den Vergleich der Ergebnisse der Simulation mit den mathematischen Vorhersagen erhalten wir Einsichten darüber, wie das Verhältnis $E : V_0$ die Wahrscheinlichkeit des Tunneleffekts beeinflusst.

6.1 Theorie

Man stellt sich ein Teilchen mit der Energie E vor, das sich von der linken Seite her nähert und auf eine Potentialbarriere mit der Breite a und der Höhe V_0 trifft. Es existiert eine bestimmte Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Teilchen die Barriere durchdringt und auf der anderen Seite erscheint, sowie eine bestimmte Wahrscheinlichkeit für eine Reflektion an der Barriere.

6.1.1 Potential

Der Potentialtopf lässt sich in drei Regionen unterteilen (vgl. Abb. 21).

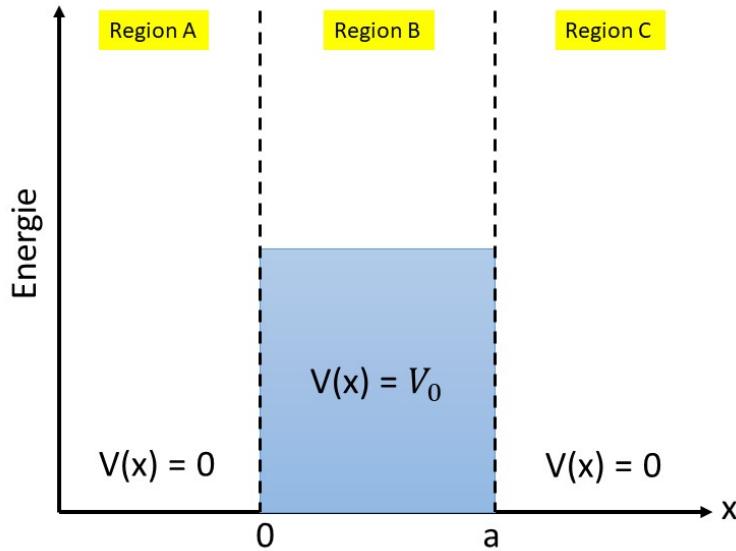


Abbildung 21: Ein Potentialtopf mit einer Energiebarriere von Breite a und Energie V_0 .

Die potentielle Energie des Systems ist²⁷:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } x < 0 \\ V_0 & \text{wenn } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{wenn } x > a \end{cases} \quad (60)$$

6.1.2 Transmissionsfaktor

Der Transmissionsfaktor T beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen durch eine Barriere durchgelassen wird.

Bestimmung der Wellenfunktionen für die verschiedenen Regionen im Potentialtopf

Zunächst einmal werden die passenden Wellenfunktionen für jeden Bereich gefunden. Die Ausgangsbasis bildet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (7), welche folgendermaßen lautet:

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

²⁷Wikipedia-Autoren: *Rectangular potential barrier* (Stand: 5.9.2023).

https://en.wikipedia.org/wiki/Rectangular_potential_barrier. [7.9.2023].

Als Erstes werden die Bereiche A und C betrachtet, in denen $V = 0$ ist (siehe Abb. 21). Dies wird in die oben genannte zeitunabhängige Schrödingergleichung eingesetzt. Dabei wird auch die Wellenzahl k_0 eingeführt. Sie ist definiert als $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ und gilt für $x < 0$ sowie $x > a$.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= E\psi(x) \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= -k_0^2 \psi(x), \text{ wobei } k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k_0^2 \psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung dieser Differenzialgleichung lautet:

$$\psi(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}$$

Somit ergeben sich die Wellenfunktionen für Region A (ψ_A) und für Region C (ψ_C). Diese können wie folgt definiert werden:

$$\psi_A(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} \quad (61)$$

$$\psi_C(x) = Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x} \quad (62)$$

Die Gleichungen repräsentieren eine Überlagerung von zwei Wellen. Eine davon bewegt sich nach links (der Term mit dem negativen Exponenten Be^{-ikx} , De^{-ikx}), die andere nach rechts (der Term mit dem positiven Exponenten Ae^{ikx} , Ce^{ikx}). Dabei stehen B und D für die Wahrscheinlichkeit, dass die Welle sich nach links bewegt, und A und C für die Wahrscheinlichkeit, dass sie nach rechts bewegt.

Für Bereich B gilt $V = V_0$, die potentielle Energie der Barriere (siehe Abb. 21). V_0 wird in die zeitunabhängige Schrödingergleichung (7) eingesetzt.

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

Es wird angenommen, dass die Energie des Teilchens $E < V_0$ ist:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V_0 - E)\psi(x) &= 0 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V_0 - E)\psi(x) = 0 \right) \frac{2m}{\hbar^2} \\ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) &= 0 \\ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + k_1^2 \psi(x) &= 0, \quad \text{wobei } k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Hier wird eine neue Wellenzahl eingeführt: $k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$. Diese gilt für $0 < x < a$.

$$\begin{cases} k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} & x < 0 \quad \text{oder} \quad x > a \\ k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar}} & 0 < x < a \end{cases}$$

Das Teilchen hat eine geringe Chance, die Barriere zu durchdringen, bis es eine bestimmte Eindringtiefe erreicht. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion schwächt sich ab, je weiter die Positionsverteilung des Teilchens in die Barriere eindringt (vgl. Abb. 22). Das Teilchen ist lokalisiert und muss durch eine Summe von Basisfunktionen mit reellen Exponenten statt komplexen ausgedrückt werden (vgl. Abb. 23).

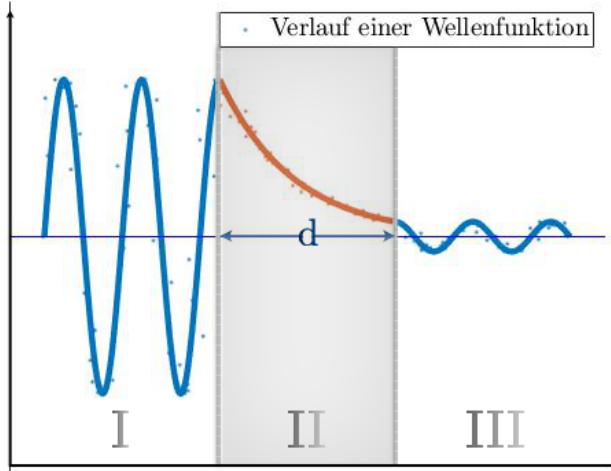


Abbildung 22: Verlauf der Wellenfunktion eines Teilchens, wenn es durch eine Barriere geht. Innerhalb der Barriere ist die Wellenfunktion lokalisiert und schwächt sich exponentiell ab. Hier steht d für die Breite der Barriere. Quelle: Anonym: *Verlauf einer Wellenfunktion*.

<https://i.stack.imgur.com/GAgsE.png>. [4.10.2023].

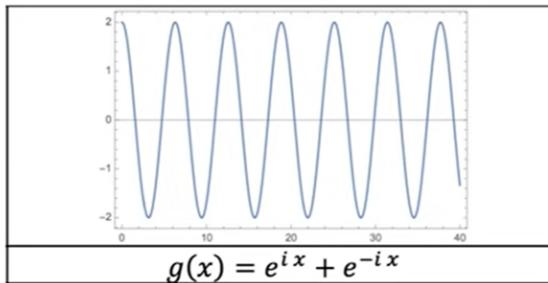
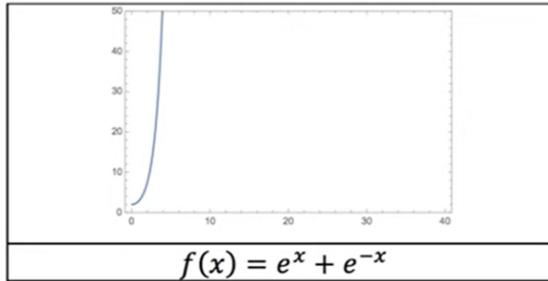


Abbildung 23: Die Funktion einer Summe von Termen mit reeller Exponenten (oben) und eine Funktion einer Summe von Termen mit komplexen Exponenten (unten). Die Funktion mit reeller Exponenten bietet eine passende Darstellung für die Wellenfunktion innerhalb der Barriere (siehe. 22), wenn es negativ wäre. Quelle: Professor Dave Explains. *The Quantum Barrier Potential Part 1: Quantum Tunneling* bei 9:58.

https://youtu.be/EMq_QbyghMU?si=lcpCrHKLMC5arVG3. [4.10.2023].

Daher ergibt sich die allgemeine Lösung für ein Teilchen in Region B mit der Energie $E < V_0$:

$$\psi_B(x) = F e^{i k_1 x} + G e^{-i k_1 x}, \text{ wobei } k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (63)$$

Die Gleichung repräsentiert eine Superposition von zwei Wellen. Davon geht eine nach links (der Term mit dem negativen Exponenten $G e^{-i k_1 x}$), und eine nach rechts (der Term mit dem positiven Exponenten $F e^{i k_1 x}$). G steht für die Wahrscheinlichkeit, dass die Welle sich nach links bewegt, und F für die

Wahrscheinlichkeit, dass sie nach rechts bewegt.

Bisher wurden die Wellenfunktionen für die jeweiligen Bereiche hergeleitet.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_A(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} & (61) \quad \text{wenn } x < 0 \\ \psi_B(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} & (63) \quad \text{wenn } 0 \leq x \leq a, \text{ und } E < V_0 \\ \psi_C(x) = Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x}, & (62) \quad \text{wenn } x > a \end{cases}$$

Die folgende Abbildung bietet eine klare Übersicht:

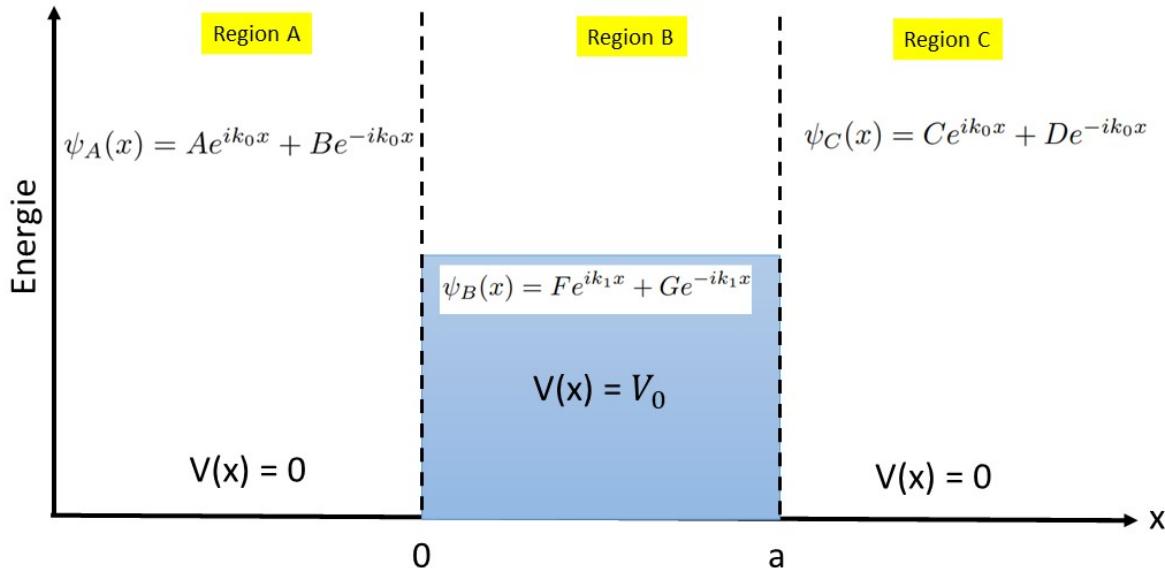


Abbildung 24: Die Wellenfunktion ψ_A , ψ_B und ψ_C für die 3 Bereiche des Potentialtopfs A, B und .

Sicherstellung der Kontinuierlichkeit der Wellenfunktionen und ihrer Ableitungen

Es gilt, die Bedingungen zu finden, unter denen die Wellenfunktionen und ihre Ableitungen im räumlichen Bereich stetig sind. Zuerst betrachtet man die Grenze bei $x = 0$, welche die Trennung zwischen den Regionen A und B markiert. Durch das Gleichsetzen von ψ_A und ψ_B wird die Kontinuität der Wellenfunktionen über diese Grenze gewährleistet.

$$\begin{aligned} \psi_A &= \psi_{B,\text{unten}} \\ Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} &= Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} \\ Ae^{ik_00} + Be^{-ik_00} &= Fe^{ik_10} + Ge^{-ik_10} \end{aligned}$$

$$A + B = F + G \tag{64}$$

Die Ableitungen der Wellenfunktionen an dieser Grenze müssen ebenfalls stetig sein, da kontinuierliche Funktionen stetige Ableitungen haben müssen.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} \psi_A &= \frac{\partial}{\partial x} \psi_B \\
\frac{\partial}{\partial x} (A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x}) &= \frac{\partial}{\partial x} (F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x}) \\
(i k_0) A e^{ik_0 x} + (-i k_0) B e^{-ik_0 x} &= (k_1) F e^{k_1 x} + (-k_1) G e^{-k_1 x} \\
(i k_0) A e^{ik_0 x} + (-i k_0) B e^{-ik_0 x} &= (k_1) F e^{k_1 x} + (-k_1) G e^{-k_1 x} \\
i k_0 A - i k_0 B &= k_1 F - k_1 G
\end{aligned} \tag{65}$$

Anschließend fokussiert man auf die Grenze bei $x = a$, die die Trennung zwischen den Regionen B und C darstellt. Dort müssen die Wellenfunktionen ψ_B und ψ_C sowie ihre Ableitungen stetig sein.

$$\begin{aligned}
\psi_B &= \psi_C \\
F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x} &= C e^{ik_0 x} + D e^{-ik_0 x}
\end{aligned}$$

Wie bereits erwähnt, beschreibt D die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen in Region C nach links bewegt, da der Exponent negativ ist. Betrachten wir ein Teilchen, das sich der Barriere von der linken Seite nähert. Es kann keine Welle von der rechten Seite der Barriere kommen, und somit gibt es keine Möglichkeit für das Teilchen, die Barriere zu überwinden und reflektiert zu werden. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen in der Region C nach links bewegt, ist daher null. Setzt man $D = 0$ ein, so verschwindet der letzte Term.

$$F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x} = C e^{ik_0 x} \tag{66}$$

Die Ableitungen der Wellenfunktionen werden ebenfalls gleichgesetzt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} \psi_B &= \frac{\partial}{\partial x} \psi_C \\
\frac{\partial}{\partial x} F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x} &= \frac{\partial}{\partial x} C e^{ik_0 x} \\
k_1 F e^{k_1 x} - k_1 G e^{-k_1 x} &= i k_0 C e^{ik_0 x}
\end{aligned} \tag{67}$$

Daraus ergeben sich vier Gleichungen ²⁸:

$$\left\{
\begin{array}{ll}
A + B = F + G & (64) \\
i k_0 A - i k_0 B = k_1 F - k_1 G & (65) \\
F e^{ik_0 x} + G e^{-ik_0 x} = C e^{ik_0 x} & (66) \\
k_1 F e^{k_1 x} - k_1 G e^{-k_1 x} = i k_0 C e^{ik_0 x} & (67)
\end{array}
\right. \tag{68}$$

²⁸Professor Dave Explains: *The Quantum Barrier Potential Part 1: Quantum Tunneling* (Stand: 3.5.2021).
https://www.youtube.com/watch?v=EMq_QbyghMU&t=462s. [7.9.2023].

Bestimmung des Transmissionsfaktors mithilfe der Wellenfunktionen

Wenn sich ein Teilchen in Region C befindet, bedeutet das, dass es die Barriere durchdrungen hat. Daher ist der Transmissionsfaktor:

$$T = \frac{P_{C,\text{rechts}}}{P_{A,\text{rechts}}} \quad (69)$$

Hierbei ist $P_{C,\text{rechts}}$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Bereich C nach rechts bewegt, und $P_{A,\text{rechts}}$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Bereich A nach rechts bewegt. Wie bereits erwähnt steht der Koeffizient A für die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Bereich A nach rechts bewegt, und der Koeffizient C für die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Bereich C nach rechts bewegt. Daher ist $\psi_{A,\text{rechts}} = A$ und $\psi_{C,\text{rechts}} = C$. Um die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Wellenfunktion zu finden, multipliziert man die ursprüngliche Funktion mit ihrer konjugierten.

$$\begin{aligned} P_{A,\text{rechts}} &= \psi_{A,\text{rechts}}^* \psi_{A,\text{rechts}} = (A^* e^{-ik_0 x}) (A e^{ik_0 x}) = A^* A \\ P_{C,\text{rechts}} &= \psi_{C,\text{rechts}}^* \psi_{C,\text{rechts}} = (C^* e^{-ik_0 x}) (C e^{ik_0 x}) = C^* C \\ T &= \frac{C^* C}{A^* A} = t^* t \end{aligned}$$

Das Ziel ist nun, T zu bestimmen. Zunächst teilt man das Gleichungssystem (68) durch A :

$$\begin{cases} 1 + r = f + g \\ ik_0 - ik_0 r = k_1 f - k_1 g \\ fe^{k_1 a} + ge^{-k_1 a} = te^{ik_0 a} \\ k_1 f e^{k_1 a} - k_1 g e^{-k_1 a} = ik_0 t^{ik_0 a} \end{cases} \quad (70)$$

Wobei $f = F/A$, $g = G/A$, und $t = C/A$.

Anschließend sucht man f , indem man die dritte Gleichung des Gleichungssystems (70) zuerst mit k multipliziert und dann mit der vierten Gleichung desselben Gleichungssystems (70) addiert:

$$\begin{aligned} &+ \left(\begin{array}{l} k_1 [fe^{k_1 a} + ge^{-k_1 a} = te^{ik_0 a}] \\ k_1 f e^{k_1 a} - k_1 g e^{-k_1 a} = ik_0 t^{ik_0 a} \end{array} \right) + \\ &f = (ik_0 t e^{ik_0 a} + k_1 t e^{ik_0 a}) / 2k_1 e^{k_1 a} \\ &f = t e^{ik_0 a} (ik_0 + k_1) / 2k_1 e^{k_1 a} \\ &f = t e^{ik_0 a} e^{-k_1 a} (ik_0 + k_1) / 2k_1 \\ &f = t e^{(ik_0 a - k_1 a)} (ik_0 + k_1) / 2k_1 \\ &f = \frac{t e^{(ik_0 - k_1)a} (ik_0 + k_1)}{2k_1} \end{aligned} \quad (71)$$

Auch g wird gesucht, indem man die dritte Gleichung von (70) mit k multipliziert und dann von der vierten Gleichung desselben Gleichungssystems (68) subtrahiert:

$$- \left(\begin{array}{l} k_1 [fe^{k_1 a} + ge^{-k_1 a} = te^{ik_0 a}] \\ k_1 f e^{k_1 a} - k_1 g e^{-k_1 a} = ik_0 t e^{ik_0 a} \end{array} \right) -$$

Das Ergebnis ist ähnlich wie bei f .

$$g = \frac{te^{(ik_0a+k_1a)} (ik_0 - k_1)}{-2k_1} \quad (72)$$

Zuletzt kann man mit den gefundenen Gleichungen von f und g den Transmissionsfaktor t herausfinden. Die erste Gleichung des Gleichungssystems (70) wird mit ik_0 multipliziert und mit der zweiten Gleichung desselben Gleichungssystems addiert:

$$\begin{aligned} ik_0[1 + r &= f + g] \\ +ik_0 - ik_0r &= kf - k_1g \\ \hline 2ik_0 &= (ik_0 + k_1)f + (ik_0 - k_1)g \end{aligned} \quad (73)$$

Die gefundenen Gleichungen von f und g werden in (73) eingesetzt und die Gleichung vereinfacht.

$$\begin{aligned} 2ik_0 &= (ik_0 + k) \frac{te^{(i_0-k_1)} (ik_0 + k_1)}{2k_1} + (ik_0 - k_1) \frac{te^{(ik_0+k_1a)} (ik_0 - k_1)}{-2k_1} \\ 2ik_0 &= \frac{te^{(ik_0-k_1)} (ik_0 + k_1)^2}{2k_1} + \frac{te^{(ik_0+k_1)} (ik_0 - k_1)^2}{-2k_1} \\ 2ik_0 &= \left[e^{-k_1a} (ik_0 + k_1)^2 - e^{k_1a} (ik_0 - k_1)^2 \right] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \end{aligned}$$

Die Gleichung wird umgeformt, um die Identität $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$ und $\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$ einzusetzen, wobei $x = ka$.

$$\begin{aligned} 2ik_0 &= \left[e^{-k_1a} (-k_0^2 + k_1^2 + 2ik_0k) - e^{k_1a} (-k_0^2 + k_1^2 - 2ik_0kv) \right] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \\ 2ik_0 &= [e^{-k_1a} (-k_0^2 + k_1^2) + e^{-k_1a} (2ik_0k_1) - e^{k_1a} (-k_0^2 + k_1^2) + e^{k_1a} (2ik_0k_1)] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \\ 2ik_0 &= [(-k_0^2 + k_1^2) (e^{-k_1a} - e^{k_1a}) + (2ik_0k_1) (e^{-k_1a} + e^{k_1a})] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \\ 2ik_0 &= [(-k_0^2 + k_1^2) (e^{-k_1a} - e^{k_1a}) + (2ik_0k_1) (e^{-k_1a} + e^{k_1a})] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \\ 2ik_0 &= [-(-k_0^2 + k_1^2) 2 \sinh(k_1a) + (2ik_0k_1) 2 \cosh(k_1a)] \frac{te^{ik_0}}{2k_1} \end{aligned}$$

Es wird nach t aufgelöst.

$$t = \frac{4ik_0k_1e^{-ik_0}}{(k_0^2 - k_1^2) 2 \sinh(k_1a) + (2ik_0k_1) 2 \cosh(k_1a)} \quad (74)$$

Nun muss man t^* finden, um den Transmissionsfaktor T zu bekommen, denn $T = t^*t$.

$$t^* = \frac{-4ik_0k_1e^{ik_0}}{(k_0^2 - k_1^2) 2 \sinh(k_1a) - (2ik_0k_1) 2 \cosh(k_1a)} \quad (75)$$

Um T zu bestimmen, multipliziert man t (74) mit t^* (75). Man kann $(k_0^2 - k_1^2)$ mit γ ersetzen und $2k_0k_1$ mit κ ersetzen.

$$\begin{aligned} T &= t^*t \\ T &= \frac{2i\kappa e^{-ik_0}}{\gamma 2 \sinh(k_1a) + i\kappa 2 \cosh(k_1a)} \cdot \frac{-2i\kappa e^{ik_0}}{\gamma 2 \sinh(k_1a) - i\kappa 2 \cosh(k_1a)} \end{aligned}$$

Der Nenner ist in der Form $(a + ib)(a - ib)$. Daher:

$$T = \frac{4\kappa^2}{4\gamma^2 \sinh^2(k_1 a) + 4\kappa^2 \cosh^2(k_1 a)}$$

$$T = \frac{\kappa^2}{\gamma^2 \sinh^2(k_1 a) + \kappa^2 \cosh^2(k_1 a)}$$

Aufgrund der Identität $\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$:

$$T = \frac{\kappa^2}{\gamma^2 \sinh^2(ka) + \kappa^2 [1 + \sinh^2(k_1 a)]}$$

$$T = \frac{\kappa^2}{\gamma^2 \sinh^2(ka) + \kappa^2 + \kappa^2 \sinh^2(k_1 a)}$$

$$T = \frac{1}{(\gamma^2/\kappa^2 + 1) \sinh^2(k_1 a) + 1} \quad (76)$$

$\gamma = k_0^2 - k_1^2$ und $\kappa = 2k_0 k_1$ werden wieder in (76) eingesetzt:

$$T = \frac{1}{\left(k_0^2 - k_1^2/2k_0 k_1 + 1\right) \sinh^2(k_1 a) + 1}$$

Schließlich werden $k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$ und $k_0 = \sqrt{2mE/\hbar}$ auch wieder eingesetzt. Somit ergibt sich der Transmissionsfaktor:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(a\sqrt{2V_0 - 2E})}{4E(V_0 - E)}} \quad (77)$$

Diese Formel funktioniert nur für $E <= V_0$ ²⁹³⁰.

6.1.3 Resonanz

Resonanz tritt auf, wenn die Energie des Teilchens so abgestimmt ist, dass sie mit einem erlaubten Energieniveau der Barriere oder des Systems übereinstimmt. Wenn diese Resonanzbedingung erfüllt ist, entsteht eine konstruktive Interferenz zwischen den einfallenden und reflektierten Wellen, was dazu führt, dass das Teilchen eine höhere Wahrscheinlichkeit hat, die Barriere zu durchtunnellen. Die Absicht ist, herauszufinden, bei welcher Wellenzahl k_1 Resonanz innerhalb der Barriere auftritt, sodass die Transmission ein lokales Maximum erreicht.

Die Gleichung für die Wellenzahl k_1 lautet $\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$ (vgl. Gleichung (63)). Es ist bekannt, dass die Eigenenergie eines Potentialtopfes $E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ beträgt. Unter Berücksichtigung der zusätzlichen Potentialbarriere mit einer Energie von V_0 wäre die resultierende Eigenenergie:

²⁹Professor Dave Explains: *The Quantum Barrier Potential Part 2: Defining the Transmission and Reflection Coefficients* (Stand: 28.5.2021). <https://youtu.be/kUR98x1tH0c?si=99w5bfQITFbAhNKs>. [7.9.2023].

³⁰Anchordoqui, Luis A.: *Quantum Mechanics Lesson V* (Stand: 5.3.2019).
https://www.lehman.edu/faculty/anchordoqui/400_5.pdf. [7.9.2023].

$$E = V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (78)$$

Die Eigenenergie (78) wird in $k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$ (63) eingesetzt.

$$k_1 = \sqrt{2m \left(V_0 - \left(V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \right) \right) / \hbar}$$

Nach Vereinfachung ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot a} &= n\pi \\ k_1 a &= n\pi \quad \text{wobei } n = 1, 2, 3\dots \end{aligned} \quad (79)$$

Daher weißt man, dass Resonanz bei $k_1 a = n\pi$ (79) auftritt, und die Transmission ein lokales Maximum wird ³¹.

³¹Blatter, G.: *Quantenmechanik* (Stand: 2014). https://edu.itp.phys.ethz.ch/hs14/QMI/qmI_skript.pdf. [4.10.2023].

6.2 Simulation und Resultate

6.2.1 Simulation

Das Gaußsche Wellenpaket dient als die anfängliche Wellenfunktion, während die Potentialbarriere als das Potential des Systems dient. Um den Anteil der ursprünglichen Welle zu ermitteln, die die Barriere durchdringt, wird das Integral der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion auf der rechten Seite der Barriere nach der Transmission berechnet. Es wird für Energien $E = 1$ bis $E = 25$ simuliert. Die Energie der Barriere V_0 bleibt bei 5.

```
def potentialbarriere(x, V0, w):
    # Potentialbarriere mit der Höhe V0 und der Breite w- für den Tunneleffekt
    return np.where((0 <= x) & (x < w), V0, 0.0)

def gaussche_wellenpaket(x, x0, sigma0, e):
    # Gaußsches Wellenpaket bei x0 +/- Breite sigma0 mit Energie E.
    p0 = np.sqrt(2 * e)
    A = (2 * np.pi * sigma0 ** 2) ** (-0.25)
    return A * np.exp(1j * p0 * x - ((x - x0) / (2 * sigma0)) ** 2)

e = 1    # Energie des Wellenpakets (1 bis 25)
V0 = 5   # Potentialenergie Barriere (konstant = 5)
psi0 = gaussche_wellenpaket(x=x, x0=20, sigma0=3, e=e)      # Potential
V = potentialbarriere(x=x, V0=V0, w=1)  # Ausgangswellenfunktion

# Misst wie viel Prozent der ursprünglichen Welle durch die Barriere gegangen ist
transmission = sum(aufenthaltswahrscheinlichkeit[20][520:-1])/(grid/a)
print(round(transmission, 2))
```

Abbildung 25: Die Funktion "potentialbarriere" wird als Potential des Systems verwendet, und die Funktion "gaussche_wellenpaket" wird als Ausgangswellenfunktion verwendet. Die Variabel "e", was für die Energie des Teilchens steht, wird beim jeden Mal des Simulierens angepasst. Die vorletzte Zeile misst den Anteil der Transmission.

Mit einem anderen Programm werden die Transmissionswahrscheinlichkeiten mithilfe der Formel (77), die hergeleitet wurden, berechnet. Es wird nur für $E \leq V$ berechnet, denn die Formel funktioniert für $E > V$ nicht.

```

def transmission_berechnen(E, V0, a):
    if E < V0:
        k1 = np.sqrt((2 * V0 - 2 * E) / hbar **2)
        u = (V0 * np.sinh(k1 * a)) ** 2
        d = 4 * E * (V0 - E)
    elif E > V0:
        k1 = np.sqrt((2 * E - 2 * V0)/hbar **2)
        u = (V0 * np.sinh(k1 * a)) ** 2
        d = 4 * E * (E - V0)
    else:
        return 1/(1 + (a**2 * V0 / 2 * hbar**2))

    T = 1 / (1 + (u / d))
    return T

# Parameter
hbar = 1      # reduzierte Plank'sche Konstante
V0 = 5        # Potentialenergie Barriere (konstant = 5)
a = 1         # Breite der Barriere (konstant = 1)
m = 1.0       # Masse des Teilchens (konstant = 1)
energie = np.arange(0, 5.5, 0.5)  # Energie des Teilchens (0 bis 5)

# Berechnungen
ratios = energie / V0    # Berechnet Verhältnis E/V0
transmission_coeffs = [transmission_berechnen(E, V0, a) for E in energie]  # Berechnet Transmissionsfaktor

```

Abbildung 26: Die Funktion "transmission_berechnen" berechnet die Transmissionskoeffizienten für Energien $E = 1$ bis $E = 25$ analytisch.

6.2.2 Resultate

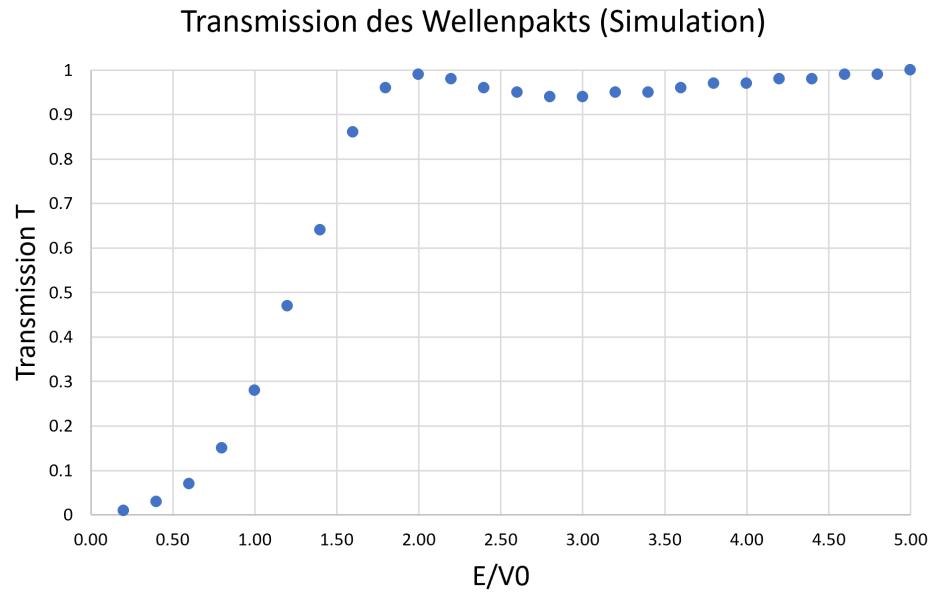


Abbildung 27: Resultate aus der Simulation für $E = 1$ bis $E = 25$, während V_0 konstant bei 5 bleibt.

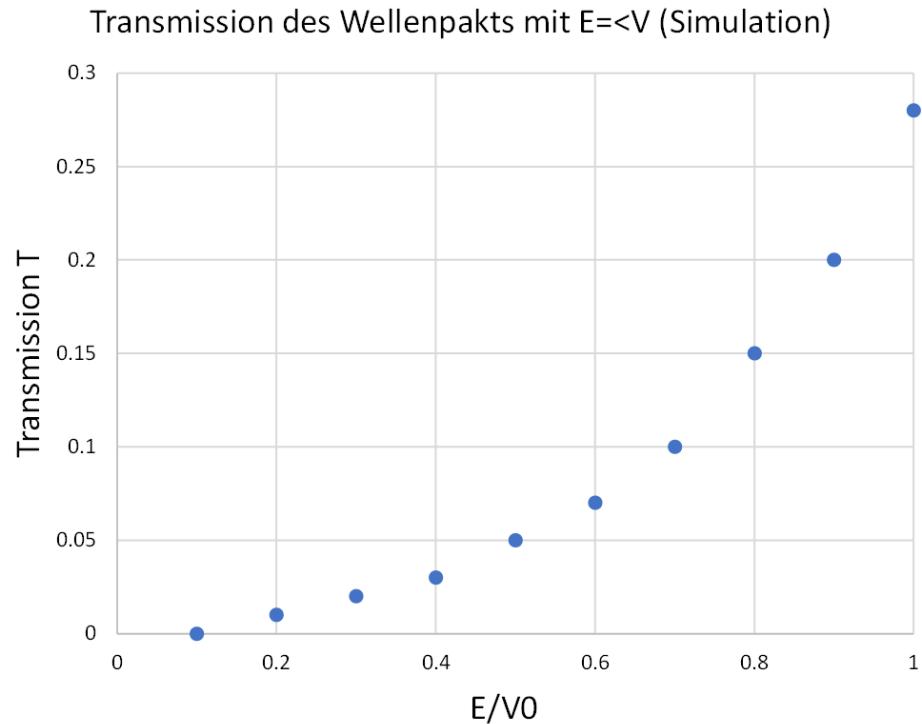


Abbildung 28: Resultate aus der Simulation für $E \leq 5$. V_0 bleibt konstant bei 5.

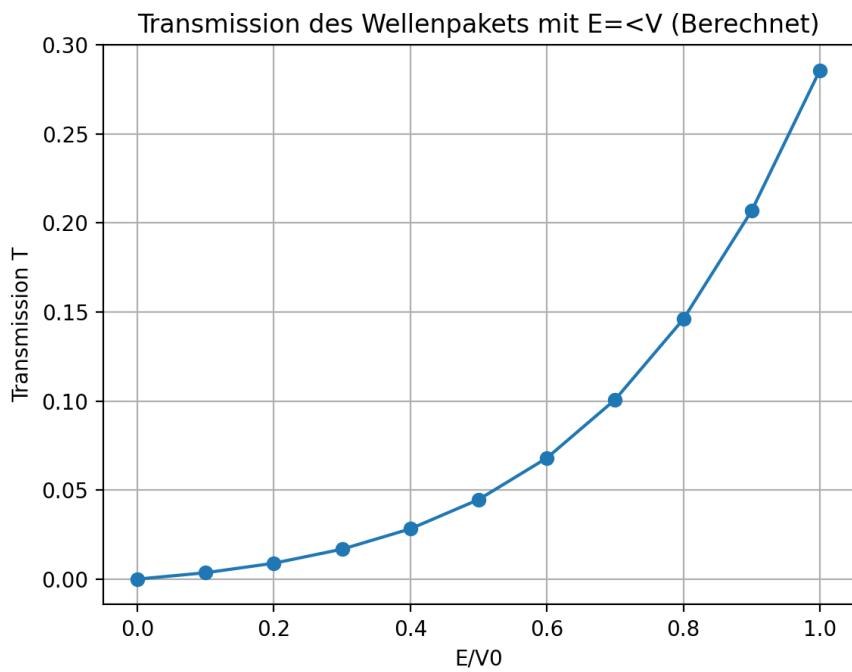


Abbildung 29: Resultate aus den Berechnungen Resultate für $E \leq 5$. V_0 bleibt konstant bei 5.

Tabelle 1: Vergleich der simulierten und berechneten Resultate

E/V	Transmission (simuliert)	Transmission (berechnet)	Abweichung
0.1	0	0	0
0.20	0.01	0.01	0
0.3	0.02	0.02	0
0.40	0.03	0.03	0
0.5	0.05	0.04	-0.01
0.6	0.07	0.07	0
0.7	0.1	0.1	0
0.8	0.15	0.15	0
0.9	0.2	0.21	0.01
1	0.28	0.29	0.01

6.3 Interpretation

6.3.1 Vergleich der simulierten und berechneten Resultate

Die Simulationsergebnisse stimmen mit den Berechnungen überein, weisen jedoch eine geringfügige Abweichung von ± 0.01 auf (vgl. Tab. 1). Die Berechnung funktioniert nur wenn die Energie des Teilchens E kleiner als die Energie der Barriere V_0 ist, weil im theoretischen Teil davon ausgegangen wurde, dass $E < V_0$. Die Wellenfunktion ψ_B beschreibt ausschließlich den Bereich unterhalb der Barriere, jedoch nicht oberhalb von ihr. Die Gleichung zur Berechnung der Transmission (77) berücksichtigt lediglich den "reinen" Tunneleffekt, ohne die "Über-Barriere-Reflexion" einzubeziehen. Die analytische Berechnung der Transmission von Teilchen durch eine Barrieren, wenn die Energie des Teilchens größer ist als die Potentialschwelle, stellt eine anspruchsvollere Aufgabe dar. Dafür braucht man numerische Methoden, wie das Python-Programm, das solche Szenarien simulieren kann.

Die Resultate aus der Simulation und den Berechnungen für $E < V_0$ zeigen im Grunde eine hohe Übereinstimmung. Dies belegt die Präzision und Richtigkeit des Python-Programms.

6.3.2 Einfluss des Verhältnisses $E : V_0$ auf die Transmission wenn $E < V_0$

Die Ergebnisse verdeutlichen, dass Teilchen mit einer Energie E , die kleiner ist als die Energie der Barriere V_0 , dennoch eine nicht zu vernachlässigende Wahrscheinlichkeit besitzen, diese zu überwinden. In der klassischen Physik wäre dies als unmöglich angesehen worden, jedoch zeigt sich hier die signifikante Auswirkung der Wellennatur von Teilchen auf quantenmechanischer Ebene.

Die Transmission nimmt zu, wenn die Energie des Teilchens E größer wird. Das liegt daran, dass die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen eine Barriere durchtunnelt, von der Überlappung der Wellenfunktion mit der Barriere abhängt. Wenn die Wellenfunktion eines Teilchens die Barriere erreicht, kann es passieren, dass ein Teil der Wellenfunktion mit der Barriere überlappt. Das bedeutet, dass es eine Wahrscheinlichkeit gibt, das Teilchen sowohl vor als auch hinter der Barriere zu finden. Je größer diese Überlappung ist, desto wahrscheinlicher ist es, dass das Teilchen durch die Barriere "tunnelt". Eine höhere Energie bedeutet eine höhere Frequenz und kürzere Wellenlänge der zugehörigen Wellenfunktion. Mit einer kürzeren Wellenlänge passt die Wellenfunktion besser zu den Details der Barriere, was zu einer höheren Überlappung und somit einer größeren Chance führt, durchzutunneln.³²

Der Tunneleffekt ist ein eindrucksvolles Beispiel dafür, wie sich die Quantenmechanik fundamental von der klassischen Physik unterscheidet.

6.3.3 Einfluss des $E : V_0$ Verhältnisses auf die Transmission wenn $E > V_0$

Aus den Resultaten sieht man, dass wenn $E > V_0$, die Transmission mit zunehmenden $E : V_0$ Verhältnis zunimmt, bis $E : V_0 = 2$. Das ist gleich wie wenn $E < V_0$. Jedoch nimmt die Transmission mit zunehmenden $E : V_0$ Verhältnis nach $E : V_0 = 2$ leicht ab (vgl. Abb. 27). Dieses scheinbar widersprüchliche Verhalten ist ein direktes Ergebnis der Welleneigenschaften von Teilchen in der Quantenmechanik und wird oft als "Über-Barriere-Reflexion" bezeichnet.

Selbst wenn ein Teilchen mehr Energie als die Höhe einer Potentialbarriere hat, gibt es dennoch eine gewisse Wahrscheinlichkeit, dass es von der Barriere reflektiert wird. In der klassischen Physik würde man

³²ETH Zürich: *9 Grundlagen der Quantenmechanik* (Stand: o.D.).

<https://quudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch9.html>. [7.9.2023].

erwarten, dass ein Teilchen mit ausreichender Energie die Barriere überwindet und auf der anderen Seite weitergeht. Das ist jedoch nicht immer der Fall in der Quantenwelt. Gemäß den Prinzipien der Quantenmechanik kann die Wahrscheinlichkeitsamplitude eines Teilchens, die durch die Barriere hindurchtunnelt könnte, nicht einfach auf null reduziert werden, wenn die Energie des Teilchens größer als die Barriereförde ist. Stattdessen kann ein Teilchen mit genug Energie, das auf die Barriere trifft, sowohl eine reflektierte als auch eine transmittierte Wellenfunktion haben. Die Wahrscheinlichkeiten für Reflexion und Transmission sind nicht immer klar in binären "1" oder "0" aufgeteilt, sondern sie sind in der Quantenmechanik als Wahrscheinlichkeitsamplituden präsent. Dies bedeutet, dass es eine bestimmte Wahrscheinlichkeit gibt, dass das Teilchen von der Barriere reflektiert wird, auch wenn es aus klassischer Sicht die Energie hätte, die Barriere zu überwinden. Die Über-Barriere-Reflexion zeigt, dass die Quantenmechanik subtile und oft kontraintuitive Effekte mit sich bringt, die bei der Betrachtung von Partikeln und ihren Wechselwirkungen berücksichtigt werden müssen.³³

Resonanz

Die Transmission erreicht 1 bei $E/V_0 = 2$ und 5 (vgl. Abb 27). Es liegt an der Resonanz, die bei $k_1 a = n\pi$ (79) auftritt und zu einer erhöhten Transmission führt. Die Resultate aus der Simulation entsprechen der Theorie.

Bei $E/V_0 = 2$ ist $E = 10$. Das kann man in $k_1 a$ einsetzen

$$k_1 a = \sqrt{2m(E - V_0)a/\hbar} = \sqrt{2(10 - 5)} \\ k_1 a = 3.16 \approx 3.14 = 1\pi$$

Man kann für $E/V_0 = 5$ das Gleiche machen. Dabei ist $E = 25$

$$k_1 a = \sqrt{2m(E - V_0)a/\hbar} = \sqrt{2(25 - 5)} \\ k_1 a = 6.32 \approx 6.28 = 2\pi$$

Es ist offensichtlich, dass bei $E/V_0 = 2$ und $E/V_0 = 5$ die Resonanzbedingung $k_1 a = n\pi$ erfüllt ist. Beim Einsetzen der entsprechenden Werte in $k_1 a$ erhält man Vielfache von π . Diese Resonanz der Wellenfunktion mit der Potentialbarriere führt zu einer erhöhten Transmission. Dieses Phänomen basiert auf den Welleneigenschaften von Teilchen. Es erklärt, warum bestimmte Energieniveaus des Teilchens eine höhere Wahrscheinlichkeit haben, die Barriere zu durchqueren, während andere Energieniveaus weniger wahrscheinlich sind.

³³Jaffe, R.L.: *Reflection above the barrier as tunneling in momentum space* (Stand:2.11.2009). https://www.researchgate.net/publication/45880209_Reflection_above_the_barrier_as_tunneling_in_momentum_space. [4.10.2023].

7 Diskussion

Insgesamt verliefen die Untersuchungen vielversprechend. Das eigens entwickelte Python-Programm hat sich als robust erwiesen und lieferte Ergebnisse, die im Einklang mit meinen Erwartungen stehen. Diese erfolgreiche Umsetzung bestätigt die Anwendbarkeit der numerischen Methodik auf die Untersuchung von quantenmechanischen Modellen. Die Simulationen bieten wertvolle Einblicke in die Verhaltensweisen von quantenmechanischen Teilchen in verschiedenen Energiepotentialen. Die Simulation verdeutlicht grundlegende Prinzipien der Quantenmechanik, wie die Wellennatur von Teilchen, die Heisenberg-Unschärferelation, und das Prinzip der Eigenzuständen. Das Herleiten verschiedener Zusammenhänge sowie die Demonstration verschiedener quantenmechanischer Phänomene haben mein Verständnis der Quantenmechanik vertieft und deren Unterschied zur klassischen Mechanik verdeutlicht.

8 Literaturverzeichnis

1. Blatter, G.: *Quantenmechanik* (Stand: 2014). https://edu.itp.phys.ethz.ch/hs14/QMI/qmI_skript.pdf. [4.10.2023].
2. Cruzeiro, V., Gao, X. & Kleiman, V.: *Particle in a Finite Potential Box (Python Notebook)* (Stand: o.D.). [https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Interactive_Applications/Jupyter_Notebooks/Particle_in_a_Finite_Potential_Box_\(Python_Notebook\)](https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Interactive_Applications/Jupyter_Notebooks/Particle_in_a_Finite_Potential_Box_(Python_Notebook)) [7.9.2023].
3. Weidemann, Tom: *Superposition and Interference* (Stand: o.D.). https://phys.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD%3A_Physics_9B__Waves_Sound_Optics_Thermodynamics_and_Fluids/01%3A_Waves/1.04%3A_Superposition_and_Interference. Superposition and Interference (Stand: o.D.). https://phys.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD%3A_Physics_9B__Waves_Sound_Optics_Thermodynamics_and_Fluids/01%3A_Waves/1.04%3A_Superposition_and_Interference. [1.10.2023].
4. Anchordoqui, Luis A.: *Quantum Mechanics Lesson V* (Stand: 5.3.2019). https://www.lehman.edu/faculty/anchordoqui/400_5.pdf. [7.9.2023].
5. CodingPhysics: *Schrodinger Equation Simulator* (Stand: o. D.). <http://www.schrodingerequation.online/>. [7.9.2023].
6. Dudik, Rachel: *The Quantum Harmonic Oscillator* (Stand: 5.4.2004). http://physics.gmu.edu/~dmaria/590%20Web%20Page/public_html/qm_topics/harmonic/. [7.9.2023].
7. ETH Zürich: *9 Grundlagen der Quantenmechanik* (Stand: o.D.). <https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch9.html>. [7.9.2023].
8. ETH Zürich: *Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* (Stand: o.D.). ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/chab/physical-chemistry/ultrafast-spectroscopy-dam/documents/lectures/allgemeinechemieHS21/Folien/ACPCI_HS21_W11.pdf. [30.9.2023]
9. Fowler, Michael: *Wave Equations, Wavepackets and Superposition* (Stand: o.D.). [https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_\(Fowler\)/01%3A_Reviewing_Elementary_Stuff/1.03%3A_Wave_Equations%2C_Wavepackets_and_Superposition](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_(Fowler)/01%3A_Reviewing_Elementary_Stuff/1.03%3A_Wave_Equations%2C_Wavepackets_and_Superposition). [30.9.2023].
10. Jaffe, R.L.: *Reflection above the barrier as tunneling in momentum space* (Stand: 2.11.2009). https://www.researchgate.net/publication/45880209_Reflection_above_the_barrier_as_tunneling_in_momentum_space. [4.10.2023].
11. LibreTexts: *The Harmonic Oscillator Energy Levels* (Stand: o.D.). https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_Georgia/CHEM_3212/03%3A_Quantum_Review/3.2%3A_The_Harmonic_Oscillator_and_the_Rigid_Rotor/3.2.04%3A_The_Harmonic_Oscillator_Energy_Levels [7.9.2023].
12. M. Arndt & A. Zeilinger: *Wo ist die Grenze der Quantenwelt?* In: Im Blickpunkt. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/phbl.20000560316>. [3.10.2023].
13. MIT OpenCourseWare: *Particle in a box* (Stand: Frühling 2011). https://ocw.mit.edu/courses/6-007-electromagnetic-energy-from-motors-to-lasers-spring-2011/resources/mit6_007s11_lec40/ [7.9.2023].

14. Mr. P Solver: *Time-Dependent Schrodinger Equation in Python: Two Different Techniques* (Stand: 21.6.2021). <https://www.youtube.com/watch?v=kVjg3jbM3Pw&t=1176s>. [7.9.2023].
15. Openstax, Rice University: *The Quantum Harmonic Oscillator* (Stand: o.D.). <https://openstax.org/books/university-physics-volume-3/pages/7-5-the-quantum-harmonic-oscillator>. [7.9.2023].
16. Professor Dave Explains: *Particle in a Box Part 1: Solving the Schrödinger Equation* (Stand: 11.9.2020). <https://youtu.be/LBB39u8dNw0?si=6GsA6KQpAMUFwWwm>. [7.9.2023].
17. Professor Dave Explains: *The Quantum Barrier Potential Part 2: Defining the Transmission and Reflection Coefficients* (Stand: 28.5.2021). <https://youtu.be/kUR98x1tH0c?si=99w5bfQITFbAhNKs>. [7.9.2023].
18. Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 1: The Classical Harmonic Oscillator* (Stand: 12.11.2021). https://youtu.be/yG_0t9rsNaw?si=b9RfxPGyzmFjE0Ww. [7.9.2023].
19. Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 2: Solving the Schrödinger Equation* (Stand: 26.11.2021). <https://youtu.be/129vbExLSak?si=vT5PetSxxp3JvRzS>. [7.9.2023].
20. Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 3: Interpretation and Application* (Stand: 10.12.2021). <https://www.youtube.com/watch?v=ocB9V8Dnb3o&t=911s>. [7.9.2023].
21. Professor Dave Explains: *The Quantum Barrier Potential Part 1: Quantum Tunneling* (Stand: 3.5.2021). https://www.youtube.com/watch?v=EMq_QbyghMU&t=462s. [7.9.2023].
22. Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen: *Gaussian wave packets* (Stand: o.D.). <https://www.cond-mat.de/teaching/QM/JSim/wpack.html>. [7.9.2023].
23. Rioux, Frank: *The Quantum Harmonic Oscillator* (Stand: o.D.). <https://faculty.csbsju.edu/frioux/sho/QuantumOscillator.pdf>. [4.10.2023].
24. Schwartz, Matthew: *Wave Packets and Dispersion* (Stand: o.D.). <https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/lecture11-wavepackets.pdf>. [8.9.2023].
25. Uni Bielefeld: *Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems* (Stand: o.D.). https://www.physik.uni-bielefeld.de/~borghini/Teaching/Theorie-II_17/05_23.pdf. [30.9.2023]
26. Wikipedia Autoren: *Schrödingergleichung* (Stand: 7.9.2023). <https://de.wikipedia.org/wiki/Schr%C3%B6dingergleichung>. [7.9.2023].
27. Wikipedia-Autoren: *Materiewelle* (Stand: 17.9.2023). <https://de.wikipedia.org/wiki/Materiewelle>. [4.10.2023].
28. Wikipedia-Autoren: *Parität (Physik)* (Stand: 12.2.2023). [https://de.wikipedia.org/wiki/Parit%C3%A4t_\(Physik\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Parit%C3%A4t_(Physik)). [3.10.2023].
29. Wikipedia-Autoren: *Rectangular potential barrier* (Stand: 5.9.2023). https://en.wikipedia.org/wiki/Rectangular_potential_barrier. [7.9.2023].

9 Abbildungsverzeichnis

1. Anonym: *Verlauf einer Wellenfunktion.* <https://i.stack.imgur.com/GAgxE.png>. [4.10.2023].
2. Christian: *The harmonic oscillator wavefunctions (Psi1).* <https://scipython.com/static/media/uploads/blog/sho/sho-psi1-6.png>. [3.10.2023]
3. Christian: *The harmonic oscillator wavefunctions (Psi2).* <https://scipython.com/static/media/uploads/blog/sho/sho-psi2-6.png>. [3.10.2023]
4. Gerlach, Stephan: *Der Oszillator.* https://doi.org/10.1007/978-3-662-59246-5_13 [3.10.2023].
5. Professor Dave Explains. *The Quantum Barrier Potential Part 1: Quantum Tunneling* bei 9:58. https://youtu.be/EMq_QbyghMU?si=lcpCrHKLMC5arVG3. [4.10.2023].
6. Professor Dave Explains: *The Quantum Harmonic Oscillator Part 2: Solving the Schrödinger Equation* bei 10:52. <https://www.youtube.com/watch?v=129vbExLSak> [3.10.2023].
7. Uni Frankfurt: *Überlagerung gebundener Zustände.* <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/qm1-ss09/wavepack/fin-potb1.gif> [30.9.2023].
8. Wikimedia: *Infinite Potential Well.* https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/27/Infinite_potential_well.svg [26.9.2023].

10 Anhang

Eine benutzerfreundliche App als exe-Datei zur Simulation quantenmechanischer Modelle.

Die Parameter sind anpassbar. Diese exe-Datei funktioniert nur am Computer.

<https://drive.google.com/file/d/1mG2v9AKxGMEnedR3SAAH0Wx1JFXSDfVm/view?usp=sharing>



Der Link zum vollständigen Python-Code auf Github:

<https://github.com/christie3406/Schr-dinger/tree/main>

