

# Simulation von Schrödinger-Wellenpaketen

Hendrik van Hees

17. Mai 2009

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Allgemeines zur Lösung der Schrödingergleichung</b>	<b>1</b>
1.1	Problemstellung . . . . .	2
1.2	Asymptotik der Energieeigenfunktionen . . . . .	3
1.3	Kontinuitätsgleichung . . . . .	5
1.4	Zur Normierung der Energieeigenfunktionen . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Freie Teilchen</b>	<b>9</b>
<b>3</b>	<b>Potentialschwelle</b>	<b>10</b>
3.1	Totalreflexion ( $E_0 = 0.3 V_0$ ) . . . . .	12
3.2	Kleiner durchlaufender Anteil ( $E_0 = 0.5 V_0$ ) . . . . .	13
3.3	Mittlere Energie: $E_0 = 1.2 V_0$ ( $\Delta E = 0.3 V_0$ ) . . . . .	13
3.4	Mittlere Energie: $E_0 = 1.5 V_0$ ( $\Delta E = 0.35 V_0$ ) . . . . .	13
3.5	Mittlere Energie: $E_0 = 6.0 V_0$ ( $\Delta E = 0.69 V_0$ ) . . . . .	14
3.6	Streuzustände . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Potentialtopf</b>	<b>15</b>
4.1	Bindungszustände mit gerader Parität . . . . .	16
4.2	Bindungszustände mit ungerader Parität . . . . .	18
4.3	Ungebundene Energieeigenzustände . . . . .	19
4.4	Demonstration des Resonanzphänomens . . . . .	20
4.5	Mittlere Energie: $E_0 = 0.24 V_0$ . . . . .	21
4.6	Überlagerung gebundener Zustände . . . . .	21

## 1 Allgemeines zur Lösung der Schrödingergleichung

Die html-Version dieses Artikels findet sich unter

<http://itp.uni-frankfurt.de/~hees/qm1-ss09/wavepack/wavepack.html>

## 1.1 Problemstellung

Im folgenden betrachten wir Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem Potential entlang der  $x$ -Achse:

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = \mathbf{H}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t). \quad (1)$$

Wir werden uns auf die grundlegenden physikalischen Argumente beschränken. Eine ausführlichere Behandlung der mathematischen Struktur der Schrödingergleichung findet sich in [Mes99].

Wir betrachten Potentiale, die im Unendlichen bestimmten konstanten Grenzwerten zustreben:

$$\lim_{x\rightarrow\infty} V(x) = V_0, \quad \lim_{x\rightarrow-\infty} V(x) = 0. \quad (2)$$

Dabei muß die Konvergenz gegen diese Werte schneller als mit  $1/x$  erfolgen, d.h. es soll genauer

$$\lim_{x\rightarrow\infty} x[V(x) - V_0] = 0, \quad \lim_{x\rightarrow-\infty} xV(x) = 0 \quad (3)$$

gelten. Es ist klar, daß die Wahl 0 des Grenzwertes für  $x \rightarrow 0$  keine Beschränkung der Allgemeinheit bedeutet, da wir in dem Falle, daß das Potential dort gegen einen anderen Grenzwert strebt, durch eine einfache Verschiebung des Energienullpunkts die hier betrachtete Situation herstellen können, ohne daß dies den physikalischen Gehalt der Betrachtung ändert.

Wir können nun die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (1) nach Energieeigenfunktionen entwickeln. Die Energieeigenfunktionen sind durch das Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E''(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (4)$$

gegeben. Dabei wird i.a. die Menge der Energieeigenwerte sowohl einen diskreten als auch einen kontinuierlichen Anteil enthalten. Wie wir gleich sehen werden, entsprechen die diskreten Energieeigenwerte gebundenen Zuständen, denn die dazugehörigen Energieeigenfunktionen  $\psi_E$  sind quadratintegrabel und können auf 1 normiert werden. Die Eigenfunktionen zu kontinuierlichen Eigenwerten besitzen im Unendlichen asymptotisch den Charakter ebener Wellen und beschreiben dort somit die ungebundene „quasifreie“ Bewegung des Teilchens. Diese Wellenfunktionen werden auf die  $\delta$ -Distribution in der Energie normiert.

Numerieren wir die diskreten Energieeigenwerte und -eigenfunktionen mit  $n \in \mathbb{N}$  durch (dabei können je nach der konkreten Form des Potentials i.a. sowohl endlich oder unendlich viele als auch gar keine diskreten Energieeigenwerte existieren) und bezeichnen die Menge der kontinuierlichen Eigenwerte mit  $C_E \subseteq \mathbb{R}$ , so verlangen wir also

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}^*(x)\psi_n(x) = \delta_{nn'}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E'}^*(x)\psi_E(x) = \delta(E - E') \quad \text{für } E, E' \in C_E. \quad (5)$$

Daß die Eigenfunktionen zu verschiedenen Energieeigenwerten orthogonal zueinander sind, folgt allgemein aus der Hermitezität des Hamiltonoperators (s. Vorlesung).

Es ist dann leicht zu zeigen, daß in der Tat jede Funktion

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \psi_n(x) + \int_{C_E} dE c(E) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(x) \quad (6)$$

die zeitabhängige Schrödingergleichung (1) löst.

Wie man leicht mit Hilfe der Orthonormierungsbedingungen (5) nachweist (vgl. Präsenzübung 6 c), hängt die Normierung von  $\Psi(x, t)$  mit der Normierung der  $c_n$  und  $c(E)$  zusammen vermöge

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 = \sum_n |c_n|^2 + \int_{C_E} dE |c(E)|^2 \stackrel{!}{=} 1. \quad (7)$$

Bei vorgegebener Anfangswellenfunktion  $\Psi(x, t = 0)$  sind die Koeffizienten  $c_n$  und  $c(E)$  in (6) durch

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \Psi(x, t = 0), \quad c(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \Psi(x, t = 0) \quad (8)$$

bestimmt (man rechne das nach!). Haben wir uns die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen beschafft, können wir also die Schrödingergleichung bei irgendeiner vorgegebenen Anfangsbedingung lösen, wobei i.a. die Entwicklung (6) i.a. nur numerisch konkret ausgewertet werden kann.

## 1.2 Asymptotik der Energieeigenfunktionen

Betrachten wir nun also das Energieeigenwertproblem für die Potentiale der oben beschriebenen Art. Zur Vereinfachung führen wir die folgenden Variablen ein:

$$\epsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x). \quad (9)$$

Dann können wir (4) in der Form

$$\psi_E''(x) = [U(x) - \epsilon] \psi_E(x) \quad (10)$$

schreiben. Wir wollen nun die Form der Wellenfunktion für  $x \rightarrow \pm\infty$  herausfinden.

Für  $x \rightarrow -\infty$  lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung (10) aufgrund der Annahmen über das asymptotische Verhalten des Potentials (2)

$$\psi_E''(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} -\epsilon \psi(x). \quad (11)$$

Diese lineare Differentialgleichung besitzt zwei linear unabhängige Lösungen  $\exp(\pm i\sqrt{\epsilon}x)$ , so daß die allgemeine Lösung eine Superposition dieser beiden Lösungen sein muß:

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} A_1 \exp(+i\sqrt{\epsilon}x) + B_1 \exp(-i\sqrt{\epsilon}x). \quad (12)$$

Wir müssen nun noch genauer über die möglichen Energieeigenwerte nachdenken. Falls nämlich  $\epsilon > 0$ , so ist  $\psi_E$  für  $x \rightarrow -\infty$  in jedem Falle ein ungebundener Zustand, d.h.  $\epsilon$  liegt im kontinuierlichen Spektrum, und es gibt keine weiteren Einschränkungen an  $\epsilon$  vom asymptotischen Verhalten im Unendlichen, und dann sind allgemeine  $A_1$  und  $B_1$  in (12) erlaubt. Falls aber  $\epsilon \leq 0$ , so ist genauer  $\sqrt{\epsilon} = i\sqrt{|\epsilon|}$  zu schreiben, und damit die Wellenfunktion für  $x \rightarrow \infty$  nicht exponentiell (bzw. für  $\epsilon = 0$  linear) anwächst, muß notwendig  $A_1 = 0$  sein, d.h. wir haben genauer

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} \begin{cases} A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) & \text{mit } k_1 = \sqrt{\epsilon} \quad \text{falls } \epsilon > 0 \\ B_1 \exp(\kappa_1x) & \text{mit } \kappa_1 = \sqrt{|\epsilon|}, \quad \text{falls } \epsilon \leq 0. \end{cases} \quad (13)$$

Für  $x \rightarrow +\infty$  ergibt sich

$$\psi_E''(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\cong} (U_0 - \epsilon)\psi(x), \quad (14)$$

und wir können exakt analoge Überlegungen wie eben anstellen. Es ergibt sich dann schließlich

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\cong} \begin{cases} A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x) & \text{mit } k_2 = \sqrt{\epsilon - U_0} \quad \text{falls } \epsilon > U_0 \\ A_2 \exp(-\kappa_2x) & \text{mit } \kappa_2 = \sqrt{U_0 - \epsilon}, \quad \text{falls } \epsilon \leq U_0. \end{cases} \quad (15)$$

Nun können wir die verschiedenen möglichen Fälle für  $\epsilon$  im Hinblick auf das Verhalten der Wellenfunktionen analysieren

- $\epsilon \leq 0$ : Dies entspricht gemäß (13) und (15) mit Sicherheit gebundenen Zuständen, d.h. die Wellenfunktion fällt für  $x \rightarrow \pm\infty$  exponentiell ab, d.h.

$$\begin{aligned} \psi_E(x) &\underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} B_1 \exp(\kappa_1x) \quad \text{mit } \kappa_1 = \sqrt{|\epsilon|} \\ \psi_E(x) &\underset{x \rightarrow \infty}{\cong} A_1 \exp(-\kappa_2x) \quad \text{mit } \kappa_1 = \sqrt{U_0 - \epsilon}. \end{aligned} \quad (16)$$

Wir werden weiter unten noch zeigen, daß diesen  $\epsilon$  notwendig diskrete Energieeigenwerte  $E = \hbar^2\epsilon/(2m)$  entsprechen. Daß es sich um gebundene Zustände handeln muß, wird auch physikalisch verständlich, wenn man sich das analoge klassische Problem vor Augen führt: Wenn  $E < 0$  ist, kann das Teilchen weder nach  $x \rightarrow \infty$  noch nach  $x \rightarrow -\infty$  laufen, da sonst der Energiesatz verletzt würde, denn die potentielle Energie  $p^2/(2m) = mv^2/2$  ist notwendig positiv und das Potential nach Annahme asymptotisch gleich 0 bzw.  $V_0 > 0$ . Damit also gebundene Zustände überhaupt möglich werden, muß das Potential irgendwo negativ werden, also eine Art „Potentialmulde“ bilden (vgl. Abb. 1). Unsere eben gefundenen asymptotischen Lösungen zeigen aber, daß eine von 0 verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens außerhalb des klassisch erlaubten Bereiches gibt! Dieses Phänomen ist klassisch nicht erklärbar und wird als **Tunnel-** oder **Gamov-Effekt** bezeichnet.

- $0 \leq \epsilon \leq U_0$ : Gemäß (13) und (15) kann sich das Teilchen nach  $x \rightarrow -\infty$  hin quasi-frei bewegen, nicht aber nach  $x \rightarrow \infty$ . Es sind alle  $E = \hbar^2\epsilon/(2m)$  in diesem Bereich erlaubt, so daß  $E$  in diesem Falle zum kontinuierlichen Bereich der Energieeigenwerte gehört. Da für  $x \rightarrow \infty$  nur genau eine, nämlich die exponentiell fallende Lösung erlaubt ist, gibt es zu jedem Wert für  $E$  genau eine Energieeigenfunktion, d.h. dieser Teil der Energieeigenwerte ist **nicht entartet**. Auch hier haben wir wieder einen Tunneleffekt. Der Bereich  $x \rightarrow \infty$  ist wie oben erläutert für das Teilchen verboten, aber die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dort nicht 0.
- $\epsilon > U_0$ : Gemäß (13) und (15) ist das Teilchen bzgl. der Bewegung nach beiden Richtungen  $x \rightarrow \pm\infty$  ungebunden. Die entsprechenden Energieeigenwerte sind also alle erlaubt und gehören somit zum kontinuierlichen Teil der Eigenwerte. In beiden Regionen sind allgemeine Superpositionen aus zwei Lösungen erlaubt, d.h. in diesem Bereich sind die Eigenwerte zweifach entartet. Auch das ist an dem klassischen Analogon verständlich: Das Teilchen kann in diesem Fall bei vorgegebener Energie in beiden asymptotischen Regionen sowohl nach rechts (entsprechend den Wellenfunktionen mit Koeffizienten  $A_{1,2}$ ) bzw. links (entsprechend den Wellenfunktionen mit Koeffizienten  $B_{1,2}$ ) laufen.

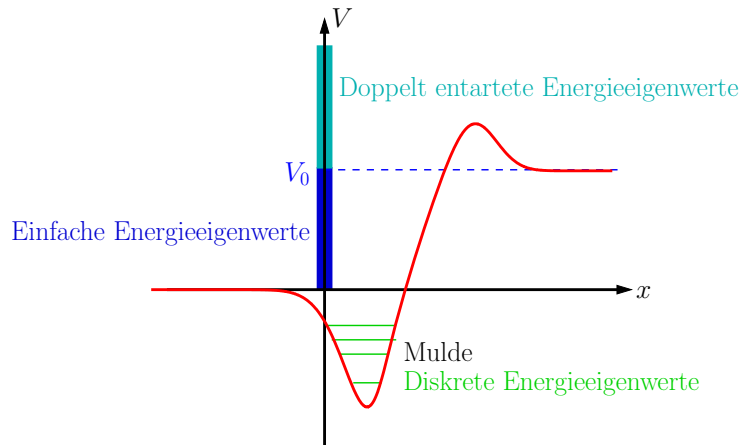


Abbildung 1: *Potential und qualitatives Energieeigenwertspektrum zum zugehörigen Schrödingerschen Energieeigenwertproblem.*

### 1.3 Kontinuitätsgleichung

Wir können weitere recht allgemeine Schlüsse aus dem asymptotischen Verhalten der Wellenfunktionen ziehen, wenn wir die Kontinuitätsgleichung für den hier diskutierten eindimensionalen Fall heranziehen. Aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung (1) folgt sofort, daß die Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho(x, t) + \partial_x j(x, t) &= 0 \quad \text{mit} \\ \varrho(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 \\ j(x, t) &= \frac{\hbar}{2im} \{ \Psi^*(x, t) \partial_x \Psi(x, t) - [\partial_x \Psi^*(x, t)] \Psi(x, t) \} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\Psi^*(x, t) \partial_x \Psi(x, t)] \end{aligned} \quad (17)$$

gilt. Für eine quadratintegrale Funktion  $\Psi(x, t)$  bedeutet dies, daß die Normierung der Wellenfunktion mit der Zeit konstant bleibt (s. Vorlesung), d.h. hat man  $\Psi$  zur Zeit  $t = 0$  auf 1 normiert, so ist dies automatisch auch für alle späteren Zeiten gewährleistet, vorausgesetzt  $\Psi$  erfüllt die Schrödingergleichung. Mathematisch gesehen ist dies Folge der **Unitarität des Zeitentwicklungsoperators**, die aus der Hermitezität des Hamiltonoperators folgt.

Für die Energieeigenfunktionen

$$\Psi_E(x, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(x), \quad (18)$$

wobei hier  $E$  sowohl im diskreten als auch im kontinuierlichen Teil des Spektrums liegen darf, ist offenbar die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$  zeitlich konstant. Dies zeichnet die Energieeigenfunktionen physikalisch als die **stationären Zustände** des Systems aus: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung als die in der Wellenfunktion enthaltene physikalisch relevante Information ist zeitlich konstant. Demgemäß muß aufgrund der Kontinuitätsgleichung auch der Strom zeitlich konstant sein. In der Tat folgt für die Wellenfunktion (18)

$$j_E(x, t) = j_E(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\psi_E^*(x) \psi_E'(x)]. \quad (19)$$

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt weiter

$$\partial_t \varrho_E(x, t) = 0 = -j_E'(x) \rightarrow j_E(x) = j_E = \text{const.} \quad (20)$$

Der Strom ist also eine Konstante.

Wir können nun den Strom für die Energieeigenzustände aus dem oben hergeleiteten asymptotischen Verhalten bestimmen.

Für gebundene Zustände ( $E < 0$ ) und die Zustände zu den einfach entarteten Energieeigenwerten im kontinuierlichen Spektrum  $0 \leq E < V_0$ , ergibt sich für  $x \rightarrow \infty$ , daß  $j_E = 0$  sein muß.

Für  $0 \leq E < V_0$  gilt andererseits im Limes  $x \rightarrow -\infty$

$$j_E = 0 = \frac{\hbar k_1}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2). \quad (21)$$

Es muß also  $|A_1| = |B_1| := 1/2|\tilde{A}_1|$  sein. Durch geeignete Wahl der Phasenfaktoren der entsprechenden beiden nach rechts bzw. links laufenden Teilwellen, können wir demnach stets erreichen, daß mit  $\tilde{A} = |\tilde{A}_1|$  gilt

$$A_1 = \frac{1}{2}\tilde{A}\exp(+i\delta_1) \quad B_1 = \frac{1}{2}\tilde{A}\exp(-i\delta_1), \quad (22)$$

und dies in (15) eingesetzt ergibt

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} \tilde{A} \cos(k_1 x + \delta). \quad (23)$$

Für  $E > V_0$  ergibt die Stromerhaltung für die Koeffizienten der asymptotischen Wellenfunktion  $x \rightarrow \pm\infty$

$$j_E = \frac{\hbar k_1}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) = \frac{\hbar k_2}{m} (|A_2|^2 - |B_2|^2). \quad (24)$$

Wir wenden uns nun nochmals den möglicherweise existierenden gebundenen Zuständen zu. Vernachlässigen wir einen Moment die Bedingung der Quadratintegrabilität der Wellenfunktionen, gibt es i.a. zu jedem  $E < 0$  zwei linear unabhängige Lösungen, die sich jeweils so wählen lassen, daß die eine im positiv Unendlichen, die andere im negativ Unendlichen exponentiell fällt:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(+)} & \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} A_1^{(+)} \exp(-\kappa_1 x) + B_1^{(+)} \exp(\kappa_1 x) \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2^{(+)} \exp(-\kappa_2 x), \end{cases} \\ \psi_E^{(-)} & \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} B_1^{(-)} \exp(\kappa_1 x) \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2^{(-)} \exp(-\kappa_2 x) + B_2^{(-)} \exp(\kappa_2 x). \end{cases} \end{aligned} \quad (25)$$

Es kann also nur dann ein gebundener Zustand vorliegen, wenn  $\psi_E^{(+)} = C\psi_E^{(-)}$  mit  $C = \text{const.}$  Dies zeigt, wie schon oben erläutert, daß die zu gebundenen Zuständen gehörigen Energieeigenwerte  $E < 0$  nicht entartet sind, d.h. wenn ein gebundener Zustand existiert, ist die dazugehörige Eigensfunktion bis auf eine Normierungskonstante eindeutig bestimmt.

Wir betrachten nun die **Wronskideterminante** zu zwei Lösungen von (10) zu Energieeigenwerten  $E$  und  $E'$

$$W(\psi_E, \psi_{E'}; x) := \psi_E(x)\psi_{E'}'(x) - \psi_{E'}(x)\psi_E'(x). \quad (26)$$

Aus (10) folgt dann unmittelbar

$$\partial_x W(\psi_E, \psi_{E'}; x) = -(\epsilon - \epsilon')\psi_E\psi_{E'}. \quad (27)$$

Für irgendein festes  $a \in \mathbb{R}$  ist also

$$W_a(\psi_E, \psi_{E'}; x) := W(\psi_E, \psi_{E'}; x) - W(\psi_E, \psi_{E'}; a) = -(\epsilon - \epsilon') \int_a^x dx' \psi_E(x')\psi_{E'}(x). \quad (28)$$

Es seien weiter zu jedem Wert  $E$  die Funktionen  $\psi_E^{(a)}$  die Lösungen der Schrödingergleichung mit fixierten Anfangsbedingungen bei  $x = a$ :  $\psi_E^{(a)}(x = a) = C_1$ ,  $\psi_E^{(a)'}(x = a) = C_2$ . Für diese Funktionen gilt dann offenbar  $W_a = W$ .

Jetzt betrachten wir die Ableitung von  $W$  für diese Funktionen nach  $\epsilon$  in der Umgebung eines Eigenwertes im kontinuierlichen Spektrum. Bezeichne dazu  $\delta$  die Variation der jeweiligen Größe bei einer Änderung von  $E$  zu  $E + \delta E$  bzw.  $\epsilon$  zu  $\delta\epsilon$ . Dann folgt einerseits aus (28)

$$\delta W_a = W(\psi_E^{(a)}, \psi_E^{(a)} + \delta\psi_E^{(a)}; x) = W(\psi_E^{(a)}, \delta\psi_E^{(a)}; x) = -\delta\epsilon \int_a^x dx [\psi_E^{(a)}(x)]^2. \quad (29)$$

Andererseits folgt für

$$f_E^{(a)}(x) = \frac{\psi_E^{(a)'}(x)}{\psi_E^{(a)}(x)} \quad (30)$$

bei Variation nach  $E$ :

$$\delta f_E^{(a)}(x) = \frac{W(\psi_E^{(a)}, \delta\psi_E^{(a)}; x)}{[\psi_E^{(a)}]^2} \quad (31)$$

Kombiniert man dies mit (29), erhält man

$$\partial_\epsilon f_E^{(a)}(x) = -\frac{1}{[\psi_E^{(a)}(x)]^2} \int_a^x dx [\psi_E^{(a)}(x)]^2. \quad (32)$$

Das bedeutet, daß die logarithmische Ableitung der Energieeigenfunktionen zu fixierten Anfangsbedingungen bei  $x = a$  monoton fallend für  $x > a$  und monoton wachsend für  $x < a$  als Funktionen von  $E$  (bzw.  $\epsilon$ ) sind.

Nehmen wir nun an, es sei  $E < 0$  ein Eigenwert im kontinuierlichen Teil des Eigenwertspektrums. Wir können dann für die Wellenfunktionen  $\psi_E^{(\pm)}$  offenbar  $a \rightarrow \pm\infty$  wählen. Die Funktion  $f_E^{(+)}(x)$  ist also bei festgehaltenem  $x$  als Funktionen von  $E$  stets monoton wachsend und  $f_E^{(-)}(x)$  monoton fallend. Wie wir oben gezeigt haben, müssen die Wellenfunktionen  $\psi_E^{(\pm)}$  aber (bis auf eine multiplikative Konstante) gleich sein, und das bedeutet  $f_E^{(+)} = f_E^{(-)}$ . Dies ist ein Widerspruch, und daher muß jedes  $E < 0$  notwendig zum diskreten Spektrum gehören.

## 1.4 Zur Normierung der Energieeigenfunktionen

Während die Normierung der Energieeigenfunktionen für diskrete Energieeigenwerte, also für gebundene Zustände, gemäß (5) kein prinzipielles Problem darstellt, müssen wir die Normierung auf die  $\delta$ -Distribution für ungebundene Zustände genauer ansehen. Für die Eigenfunktionen zu einfachen Eigenwerten ist es klar, daß das Normierungsintegral in (5)  $\propto \delta(E - E')$  ist, und wir müssen lediglich den Koeffizienten bestimmen. Für die doppelt entarteten Eigenzustände ist es nicht unmittelbar klar, daß irgendwelche zwei linear unabhängigen Lösungen orthogonal zueinander sind, aber wir können stets Linearkombinationen finden, die orthogonal sind.

Wir können also annehmen, daß die Eigenfunktionen einer vollständigen Basis allesamt zueinander orthogonal sind. Es bleibt uns also lediglich noch die Normierung für die ungebundenen Zustände zu bestimmen.

Beginnen wir mit dem Fall  $0 < E, E' \leq V_0$ . Wir haben dann, wie eben überlegt,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) = C(E) \delta(E - E'). \quad (33)$$

Zur Bestimmung der Normierung ist also nur derjenige Anteil des Integrals entscheidend, der für  $E \rightarrow E'$  divergiert, und diese Divergenz kann aufgrund des asymptotischen Verhaltens, s. (13) und (15) bzw. (23) nur von der unteren Integrationsgrenze  $-\infty$  herrühren. Wir können also bis auf einen Fehler, der im Limes  $E \rightarrow E'$  endlich bleibt, die Normierung aus dem asymptotischen Verhalten für  $x \rightarrow -\infty$  bestimmen. Dazu wählen wir zunächst den Phasenfaktor der Wellenfunktion so, daß (23) gilt. Dann ist für  $E \simeq E'$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 dx \tilde{A}(E) \tilde{A}(E') \cos[k_1 x + \delta(E)] \cos[k'_1 x + \delta(E')] \\ & \sim \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{A}(E) \tilde{A}(E') \exp[i(k_1 - k'_1)x] \\ & = \frac{1}{4} \tilde{A}^2(E) (2\pi) \delta(k_1 - k'_1) = 2\pi |A_1(E)|^2 \delta(k_1 - k'_1). \end{aligned} \quad (34)$$

Darin bedeutet  $\sim$  Gleichheit bis auf im Limes  $E \rightarrow E'$  endlich bleibende Beiträge. Weiter ist

$$\delta(k_1 - k'_1) = \delta\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} - \sqrt{\frac{2mE'}{\hbar^2}}\right) = \hbar \sqrt{\frac{2E}{m}} \delta(E - E') = \frac{\hbar^2 k_1}{m} |A_1|^2 \delta(E - E'). \quad (35)$$

Wir müssen also die Wellenfunktion so normieren, daß die Koeffizienten  $A_1$  und  $B_1$  in (13) die Bedingung

$$\frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}. \quad (36)$$

erfüllen, wobei  $|A_1|^2 = |B_1|^2$  aus der Stromerhaltung folgte (vgl. Abschn. 1.3, Gl. (21)). Anders ausgedrückt muß die Wellenfunktion so normiert sein, daß der Anteil des Stromes, der von  $x \rightarrow -\infty$  auf den Ursprung  $x = 0$  zufließt, d.h. gem. (21)

$$j_{-\infty}^{(R)} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (37)$$

normiert ist.

Für  $E > V_0$  haben wir das Problem, daß es zu jedem Energieeigenwert zwei linear unabhängige Lösungen gibt.

Im folgenden wollen wir die Situation betrachten, daß ein Wellenpaket, das zur Zeit  $t = 0$  auf einen Ort  $x_0 \rightarrow -\infty$  konzentriert ist und nach rechts läuft. Dann muß zu jeder späteren Zeit der Teil des Wellenpakets im Bereich  $x \rightarrow \infty$  ausschließlich nach rechts laufen. D.h. wir wählen für jeden Energieeigenwert  $E > V_0$  die Eigenfunktion aus, für die

$$\psi_E(x) \cong \begin{cases} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) & \text{für } x \rightarrow -\infty \\ A_2 \exp(+ik_2 x) & \text{für } x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (38)$$

ist<sup>1</sup>.

Die Normierung bestimmen wir ganz analog wie eben im Fall  $0 < E < V_0$ , wobei freilich beide asymptotischen Regionen berücksichtigt werden müssen. Es ergibt sich die Vorschrift, daß die Wellenfunktion wieder gemäß (37) normiert sein muß. Im Falle der kontinuierlichen Eigenwerte bestimmt also die Norm des bei  $x \rightarrow -\infty$  nach rechts laufenden Wellenpaketes die Normierung.

<sup>1</sup>Man kann zeigen, daß die Lösungen, die sich für  $x \rightarrow \infty$  wie  $B_2 \exp(-ik_2 x)$  verhalten, orthogonal zu den in (38) gegebenen Lösungen sind [GY03].



Die Zeitentwicklung dieser Wellenpakete ist dann gem. (6) durch

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) + \int_0^\infty dE c_E \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (39)$$

gegeben. Wie wir eben gesehen haben, bilden diese Wellenfunktionen jedoch zusammen mit den übrigen ungebundenen und gebundenen Wellenfunktionen **kein vollständiges Orthonormalsystem**, weil wir diejenigen Wellenpakete nicht berücksichtigt haben, die in der Region  $x \rightarrow \infty$  nach links laufende Anteile besitzen. Wir sondern jedoch diese Lösungen aus, um die oben beschriebene physikalische Situation eines von links her einlaufenden Wellenpakets zu beschreiben.

## 2 Freie Teilchen

Das freie Teilchen, also der Fall  $V(x) = 0$  läßt sich einfacher mit Hilfe von Impulseigenzuständen behandeln. Wir haben auf den Aufgabenblättern 1 und 2 das Gaußsche Wellenpaket für freie Teilchen ausführlich behandelt. Für unsere Simulationen wollen wir dieses Wellenpaket für  $x \ll 0$  als Anfangszustand konstruieren. Wir arbeiten aber wie oben betont in dem Unterraum mit nur nach  $x \rightarrow \infty$  hin auslaufenden Wellen. Die entsprechende auf  $\delta(E - E')$  „normierte“ Energieeigenfunktion ist nach den obigen allgemeinen Betrachtungen also durch

$$\psi_E(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar k}} \exp(ikx) \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (40)$$

gegeben.

Wir verwenden nun folgende Näherung. Im Impulsraum (geschrieben mit Wellenzahlen  $k = p/\hbar$ ) lautet das Anfangswellenpaket, das wir allerdings nicht um  $x = 0$  herum plazieren wollen, sondern bei  $x_0 \ll 0$ :

$$\tilde{\psi}_0(k) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(k - k_0)^2}{4\alpha} - ikx_0\right]. \quad (41)$$

Für unsere Rechnungen verwenden wir stattdessen den folgenden Anfangszustand in der Energiedarstellung

$$c_E = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} [\tilde{\phi}_0(k) + \tilde{\phi}_0(-k)] \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (42)$$

Zur Berechnung der zeitabhängigen Lösung integrieren wir diese Anfangswellenfunktion gem. (39). Da hier keine gebundenen Zustände existieren, ist

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dE c_E \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (43)$$

Dies ist für nicht zu breite Impulsverteilungen (also nicht zu große  $\alpha$ ) eine sehr guter Näherung für das Gaußsche Wellenpaket, wie das unten gezeigte Movie auch zeigt.

Zur Herstellung der Movies wird dieses Integral mit einer einfachen adaptiven Trapez-Simpson-Quadratur numerisch ausgewertet. Dabei ist es wegen der Singularität des Anfangszustandes (42) bei  $E = 0$  allerdings von Vorteil, nach  $k$  zu integrieren. Es ist

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dk \frac{\hbar^2 k}{m} c_E \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (44)$$

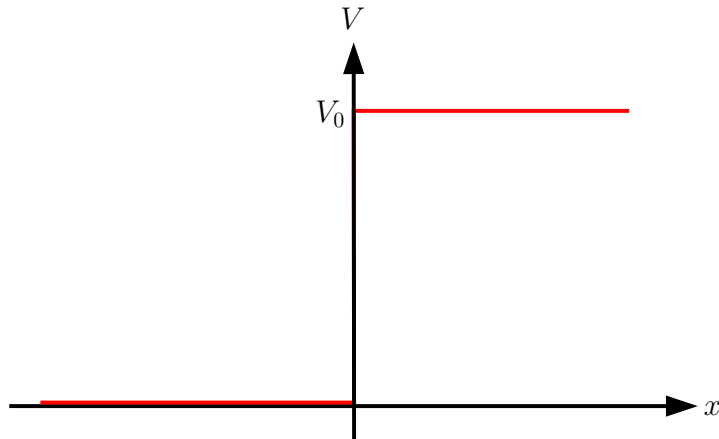


Abbildung 2: Die Potentialschwelle.

Die numerische Auswertung zeigt, daß dieses Wellenpaket (in rot gezeichnet) in der Tat mit großer Genauigkeit unser Wellenpaket (blau gestrichelt) aus Hausübung 2 reproduziert:

[Link zum Movie](#)

Wie wir in den Übungen ausführlich diskutiert haben, bleibt das Wellenpaket Gaußförmig, verbreitert sich aber aufgrund der nichtlinearen Dispersionsrelation  $\omega = \hbar k^2/(2m)$  der Schrödingerwellen mit der Zeit, d.h. der ein anfänglich auf kleinem Raum genau lokalisiertes Teilchen wird mit der Zeit immer unschärfer, und zwar desto schneller, je genauer das Teilchen anfangs lokalisiert war, denn desto breiter ist das Anfangswellenpaket im Impulsraum.

### 3 Potentialschwelle

Als einfachstes Beispiel betrachten wir nun eine Potentialschwelle der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0, \end{cases} \quad (45)$$

wobei  $V_0 > 0$  ist (s. Abb. 2). Dann sind unsere asymptotischen Lösungen für die ganzen Bereiche  $x < 0$  und  $x > 0$  exakt. Da das Potential nirgends negativ wird, gibt es keine gebundenen sondern nur ungebundene Zustände der beiden Typen. Wir haben also als Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit nach rechts laufenden Wellen für  $x \rightarrow \infty$  für  $E > V_0$ :

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \theta(-x)[A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)] + \theta(x)A_2 \exp(-\kappa_2 x) & \text{falls } E < V_0 \\ \theta(-x)[A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)] + \theta(x)A_2 \exp(ik_2 x) & \text{falls } E > V_0 \end{cases} \quad (46)$$

mit  $k_1 = \sqrt{\epsilon}$ ,  $\kappa_2 = \sqrt{U_0 - \epsilon}$  und  $k_2 = \sqrt{\epsilon - U_0}$ , wobei wir wieder zur Abkürzung  $\epsilon = 2mE/\hbar^2$  und  $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$  geschrieben haben.

Die Konstanten unterliegen nun der Einschränkung, daß die Lösungen zweimal differenzierbar sein müssen. Es müssen daher  $\psi_E$  und  $\psi'_E$  bei  $x = 0$  stetig sein. Zusammen mit der Normie-

rungsvorschrift (37) ergeben sich aus diesen Stetigkeitsbedingungen für die Koeffizienten

$$\begin{aligned} A_1 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1}}, & A_2 &= \frac{2k_1}{1+i\kappa_2} A_1, & B_1 &= \frac{k_1-i\kappa_2}{k+i\kappa_2} A_1 & \text{für } 0 < E < V_0, \\ A_1 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1}}, & A_2 &= \frac{2k}{k_1+k_2} A_1, & B_1 &= \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} A_1 & \text{für } E > V_0. \end{aligned} \quad (47)$$

Das Wellenpaket ist dann wieder durch Gl. (43) gegeben.

Ein erstes physikalisches Verständnis für diese Wellenfunktionen ergibt eine Betrachtung, die analog zur Behandlung der realistischeren Streuprozesse im dreidimensionalen Raum ist. Dabei interessiert man sich nur für das asymptotische Verhalten der Teilchen, d.h. wenn sie sich weit weg von der Schwelle bei  $x = 0$  aufhalten.

Dabei müssen wir bedenken, daß die Wellenfunktionen  $\psi_E$  keine „echten“ Zustände repräsentieren, da sie nicht quadratintegrierbar und somit nicht normierbar sind. Sie können aber als Grenzfall von echten Zuständen gedeutet werden, nämlich gerade solche, wo

$$c_E = \delta(E - E_0) \quad (48)$$

ist. Wir können uns also z.B. sehr schmale um  $E_0$  konzentrierte Gaußfunktionen vorstellen, wobei wir den Grenzfall verschwindender Breite betrachten. Physikalisch können wir deren Bedeutung nur verstehen, wenn wir bedenken, daß es sich um Wahrscheinlichkeitsamplituden handelt. Demnach repräsentieren die ebenen Wellen, aus denen sich unsere Energieeigenlösungen zusammensetzen, einen sehr lange in der Vergangenheit eingeschalteten Strom von links her auf die Schwelle zulaufenden (statistisch unkorrelierten) Teilchen mit sehr genau festgelegter Energie. Die Betragsquadrate der Energieeigenfunktionen geben dann relative Häufigkeiten an, die mit einem Detektor, der sehr lange die Teilchen an einem bestimmten Ort  $x$  zählt, gemessen werden können.

Stellen wir den Detektor irgendwo links weit weg von der Schwelle auf, wird er sowohl die einlaufenden als auch die an der Schwelle reflektierten Teilchen messen. Ein sehr weit rechts positionierter Detektor wird die Teilchen erfassen, die die Schwelle überwinden. Wir können also im Prinzip die auf den Strom der einlaufenden Teilchen normierten Wahrscheinlichkeiten messen, daß ein Teilchen, das mit einer wohldefinierten Energie  $E$  sehr weit links von der Schwelle losläuft, irgendwann reflektiert wird bzw. die Schwelle überwindet und sehr weit weg nach rechts läuft. Diese relativen Ströme bezeichnen wir als **Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten**<sup>2</sup>. Gemäß (24) sind für unsere Schwelle die Koeffizienten durch

$$\begin{aligned} R &= \frac{j_{-\infty}^L}{j_{-\infty}^R} = \begin{cases} 1 & \text{für } 0 < E < V_0 \\ \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2} & \text{für } E > V_0, \end{cases} \\ T &= \frac{j_{\infty}^R}{j_{-\infty}^R} = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < E < V_0 \\ \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_2 k_1}{(k_1+k_2)^2} & \text{für } E > V_0, \end{cases} \end{aligned} \quad (49)$$

Wegen der Stromerhaltung gilt

$$R + T = 1, \quad (50)$$

---

<sup>2</sup>Diese Koeffizienten sind als Analoga zum Streuquerschnitt in der Streutheorie zu verstehen, wobei freilich der Streuquerschnitt eine Funktion des Raumwinkels bezogen auf die Richtung der auf ein ruhendes Target zulaufenden Teilchen ist.

wie es aufgrund der Interpretation von  $R$  und  $T$  als Reflexions und Transmissionswahrscheinlichkeiten eines Teilchens auch sein muß.

Für unsere Movies wollen wir die Wahrscheinlichkeitsdichten für ein anfangs bei  $x_0 \ll 0$  konzentriertes nach rechts auf die Potentialschwelle zulaufendes Wellenpaket als Funktion der Zeit simulieren. Dies erreichen wir, indem wir  $C_E$  gemäß (42) wählen.

Dies entspricht physikalisch der Situation, daß wir einen Strom von jeweils einem einzelnen recht gut lokalisierten Teilchen beobachten und an jedem Ort  $x$  einen Detektor aufstellen, der jedesmal die Zeit erfaßt, die nach dem Losschicken des Teilchens vergangen ist, wann er das Teilchen registriert. Dann kann man wieder die relativen Häufigkeiten als Funktion der Zeit erfassen, und erhält dann genau die Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die wir im folgenden in den Movies zeigen wollen.

Dabei ist es wichtig zu bemerken, daß aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation für Ort und Impuls

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (51)$$

der Anfangsimpuls  $p_0$  relativ unbestimmt sein muß, wenn man ein auf einen relativ engen Ortsbereich um  $x_0$  fixiertes Teilchen präparieren müßte. Da das Teilchen für  $x_0 \ll 0$  als frei betrachtet werden kann, besitzt es eine entsprechende Energieunschärfe

$$\Delta E \simeq \frac{p_0}{m} \Delta p. \quad (52)$$

Selbst wenn wir also ein Wellenpaket mit  $0 < E_0 = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} < V_0$  in Gl. (42) konstruieren, wird dieses immer auch eine (wenngleich kleine) Beimischung von Wellen  $E > V_0$  beinhalten, was erklärt, daß in der Tat mit einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit, Teilchen jenseits der Schwelle detektiert werden können, **ohne daß dies dem Energieerhaltungssatz** widerspricht. Dies löst das scheinbare Paradoxon zwischen quantenmechanischem Tunneleffekt und Energieerhaltungssatz für realistische Wellenpakete, die einer quasi-klassischen Situation entsprechen, auf. Genau diese Situation betrachten wir nun in dem folgenden Movie:

### 3.1 Totalreflexion ( $E_0 = 0.3 V_0$ )

[Link zum Movie](#)

Hier wurde  $E_0 = 0.3 V_0$  gewählt. Die Energieunschärfe betrug  $\Delta E \simeq 0.16 V_0$ . Wie wir sehen, bewegt sich das Wellenpaket anfangs wie ein freies Teilchen auf die Potentialschwelle zu, wobei es sich freilich verbreitert, wie im vorigen Abschnitt erläutert. sobald die Wellenfront auf die Schwelle trifft, dringt in der Tat ein (vornehmlich stark gedämpfter) Anteil der Welle in den Bereich  $x > 0$  jenseits der Schwelle ein, während links eine stark oszillierende Wahrscheinlichkeitsverteilung auftritt, die sich aus der Interferenz zwischen der einlaufenden und der reflektierten Welle ergibt. Diese Interferenzeffekte sind charakteristisch für das quantenmechanische Verhalten Wahrscheinlichkeitsverteilung. Sie würden nicht auftreten, wenn wir einen Strom klassischer Teilchen mit entsprechend der Anfangsenergieunschärfe verteilten Energien auf eine Schwelle schießen würden. Eine eher dem klassischen Verhalten entsprechende Situation entsteht erst wieder, wenn nach einer Weile nur noch das reflektierte Wellenpaket zurückläuft. Es ist allerdings gegenüber der Anfangsverteilung wesentlich verbreitert.

Eine weitere interessante Eigenschaft ergibt sich noch aus dem Vergleich des Wellenpakets zum Verhalten eines klassischen Teilchens, das mit der mittleren Energie  $E_0$  auf die Schwelle zuläuft.

In der klassischen Mechanik wird das Teilchen in der hier simulierten Situation einfach instantan reflektiert. Die Position dieses klassischen Teilchens wird im Movie durch die vertikal eingezeichnete grüne Linie dargestellt. Wir sehen, daß sich zu Zeiten nicht zu lange, nachdem die ersten Teile der Wellenfront auf die Schwelle getroffen sind, der Schwerpunkt des reflektierten Anteils des Wellenpaketes gegenüber dem reflektierten klassischen Teilchen verzögert bewegt. Auch dies ist ein spezifisch quantenmechanischer Effekt, der durch die Phasenverschiebung der Teilwellen bei der Reflexion entsteht. Diese Phasenverschiebung läßt sich übrigens analysieren, indem man die Koeffizienten der Energieeigenmoden (46) analysiert.

### 3.2 Kleiner durchlaufender Anteil ( $E_0 = 0.5 V_0$ )

Im nächsten Movie erhöhen wir die mittlere Energie auf  $E_0 = 0.5 V_0$  und behalten  $\alpha$  bei, so daß nun die Energieunschärfe etwa  $\Delta E = 0.2 V_0$  beträgt.

[Link zum Movie](#)

Hier sehen wir, daß gegenüber dem vorigen Fall ein kleiner Anteil des Wellenpaketes auch nach  $x > 0$  propagiert. Dieser Anteil rührt von den im Anfangszustand enthaltenen Moden mit  $E > V_0$  her. Es entstehen vor dem Überschreiten des Hauptpeaks des durchlaufenden Anteils charakteristische kleinere Vorläufer.

Die Position des entsprechenden klassischen Teilchens mit der Energie  $E_0$  ist wieder durch die vertikale grüne Linie dargestellt.

### 3.3 Mittlere Energie: $E_0 = 1.2 V_0$ ( $\Delta E = 0.3 V_0$ )

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie  $E_0 = 1.2 V_0$  gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei  $x = 0$ . Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei  $x > 0$  mit um  $V_0$  verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Im Vergleich dazu wird in der quantenmechanischen Rechnung ein Teil der Welle reflektiert, d.h. mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit wird das Teilchen auch bei  $E > V_0$  an der Potentialschwelle reflektiert, und der durchlaufende Anteil bewegt sich mit gegenüber dem klassischen Teilchen größeren Geschwindigkeit.

### 3.4 Mittlere Energie: $E_0 = 1.5 V_0$ ( $\Delta E = 0.35 V_0$ )

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie  $E_0 = 1.5 V_0$  gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei  $x = 0$ . Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei  $x > 0$  mit um  $V_0$  verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Im Vergleich dazu wird in der quantenmechanischen Rechnung ein Teil der Welle reflektiert, d.h. mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit wird das Teilchen auch bei  $E > V_0$  an der Potentialschwelle reflektiert, und der durchlaufende Anteil bewegt sich mit gegenüber dem klassischen Teilchen größeren Geschwindigkeit.

### 3.5 Mittlere Energie: $E_0 = 6.0V_0$ ( $\Delta E = 0.69V_0$ )

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie  $E_0 = 6V_0$  gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei  $x = 0$ . Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei  $x > 0$  mit um  $V_0$  verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Erst bei diesen gegenüber dem Potentialsprung erheblich höheren mittleren Teilchenenergien bewegt sich das Wellenpaket wieder annähernd wie das klassische Teilchen, allerdings wie bei allen (quasi-)freien Bewegungen unter erheblicher Verbreiterung.

### 3.6 Streuzustände

In der Streutheorie betrachtet man i.a. die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in eine gegebene Richtung gestreut wird. Diese Information wird im sog. **Streuquerschnitt** angegeben. Darauf wollen wir in diesem Artikel nicht näher eingehen.

In unserem eindimensionalen Fall entsprechen diesen Wahrscheinlichkeiten die Transmissions- und Emissionskoeffizienten, die das Verhältnis der Größe des reflektierten bzw. durch die Schwelle hindurchgehenden Stromes von Teilchen angeben. Die Zustände, die wir dabei betrachtet haben, sind die stationären Energieeigenzustände. Praktisch meßbar ist so ein Strom, indem man sehr viele voneinander unabhängige Experimente mit jeweils einem Teilchen durchführt und dann die Wahrscheinlichkeitsströme als relative Häufigkeiten mißt. Dabei schickt man ein Teilchen mit recht genau bestimmter Energie, weit weg von der Potentialschwelle los und zählt nach sehr langer Zeit, wieviele Teilchen weit weg von der Schwelle reflektiert bzw. wieviele durch die Schwelle hindurchgelangt sind.

Wellenmechanisch wird diese Situation durch einen halbseitig unendlichen Wellenzug bestimmter Frequenz beschrieben, dessen Kopf sich zur Zeit  $t = 0$  weit weg von der Potentialschwelle befindet und auf die Schwelle zuläuft. Dies bezeichnet man in der Streutheorie als einen **asymptotisch freien einlaufenden Zustand bzw. kurz als „in-Zustand“**. Danach betrachtet man die Situation wieder sehr lange nachdem der Wellenkopf auf die Potentialschwelle getroffen ist. Für asymptotisch große Zeiten hat man dann den stationären Endzustand (**out-Zustand**) erreicht.

Auch diese Situation läßt sich numerisch simulieren. Wir müssen uns nur passenden in-Zustand (d.h. die Wellenfunktion zur Zeit  $t = 0$ ) verschaffen. Im Impulsraum ist dieser Zustand durch

$$\phi_0(k) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-ikx_0)}{k - k_0 + i0^+} \quad (53)$$

gegeben. In der Ortsdarstellung erhalten wir

$$\phi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \phi_0(k) \exp(ikx). \quad (54)$$

Setzen wir für  $\phi_0(k)$  (53) ein, sehen wir, daß wir das Integral über den Residuensatz berechnen können, indem wir den Integrationsweg in der oberen bzw. unteren Halbebene durch einen beliebig großen Halbkreis schließen. Damit dieser Halbkreis keinen divergenten Beitrag zum Integral liefert müssen wir wegen der Exponentialfunktion für  $x > x_0$  den oberen und für  $x < x_0$  den unteren Halbkreis wählen. Da nur in der unteren Halbebene bei  $k = k_0 - i0^+$  ein Pol liegt, haben

wir nach dem Residuensatz

$$\phi_0(x) = \frac{\Theta(x_0 - x)}{\sqrt{2\pi}} \exp[ik_0(x - x_0)]. \quad (55)$$

Diese Wellenfunktion besitzt für  $x_0 \rightarrow \infty$  die korrekte Normierung einer ebenen Welle auf die  $\delta$ -Funktion bzgl.  $k$ . Es handelt sich jedenfalls um einen Wellenzug, der für  $x < x_0$  einer ebenen Welle für ein nach rechts laufendes Teilchen mit Impuls  $k_0$ .

Die Wellenfunktion für beliebige Zeiten erhalten wir wieder, indem wir wie oben erläutert, mittels Energieeigenfunktionen die Zeitentwicklung berechnen. Die numerische Auswertung wird in den folgenden beiden Movies gezeigt.

Im ersten Movie ist  $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / (2m) = 0.6V_0$  gesetzt. In diesem Fall haben wir Totalreflexion, und die Welle dringt nur mit einem exponentiell fallenden Anteil in den Bereich  $x > 0$  vor. Für  $x \rightarrow \infty$  ist also der nach rechts gerichtete Strom 0, wie aufgrund des Transmissionskoeffizienten in (49) zu erwarten. Für große Zeiten wird der Wellenzug (in grün eingezeichnet) in dem gezeigten  $x$ -Ausschnitt stationär und identisch mit der rot eingezeichneten Energieeigenfunktion zu der gegebenen Energie  $E_0$ :

[Link zum Movie](#)

Im zweiten Beispiel ist  $E = 1.2V_0$  gesetzt, d.h. wir haben gemäß (49) sowohl einen reflektierten als auch einen durchlaufenden Anteil. Für große Zeiten nähert sich der als asymptotisch freier Anfangszustand gestartete Wellenzug (grün) wieder der stationären Lösung (rot) beliebig genau an:

[Link zum Movie](#)

## 4 Potentialtopf

Wir betrachten nun den endlich tiefen Potentialtopf, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < b, \\ 0 & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (56)$$

mit  $V_0 > 0$  (vgl. Abb. 3).

Dies ist insofern ein interessantes Problem als wir erwarten dürfen, daß es neben den Streuzuständen mit Energieeigenwerten  $E > 0$  auch gebundene Zustände mit  $E < 0$  gibt.

Das Problem, die Energieeigenzustände und dazugehörigen Energieeigenwerte zu finden, erleichtert sich erheblich durch die Symmetrie des Problems unter Raumspiegelungen. Der Raumspiegelungs- oder Paritätsoperator wirkt auf Wellenfunktionen vermöge

$$\mathbf{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (57)$$

Da offenbar  $\mathbf{P}^2 = \mathbb{1}$  gilt, sind mögliche Eigenwerte von  $\mathbf{P} = \pm 1$ . Da sich weiter der Hamiltonoperator unter Raumspiegelungen offenbar nicht ändert, also  $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{P} = \mathbf{H}$  gilt, können wir  $\mathbf{P}$  simultan zu  $\mathbf{H}$  diagonalisieren. Wir können also die gesuchten Eigenzustände von  $\mathbf{H}$  gleich als gerade bzw. ungerade Funktionen ansetzen:  $\psi_E^{(\pm)}(-x) = \pm\psi_E(x)$ .

Der Vorteil bei der Lösung des vorliegenden Problems besteht darin, daß wir uns nur um die Stetigkeitsbedingungen an der Stelle  $x = b$  zu kümmern brauchen. Wegen der Spiegelungssymmetrie erfüllen dann die Wellenfunktionen automatisch auch die Stetigkeitsbedingungen bei  $x = -b$ .

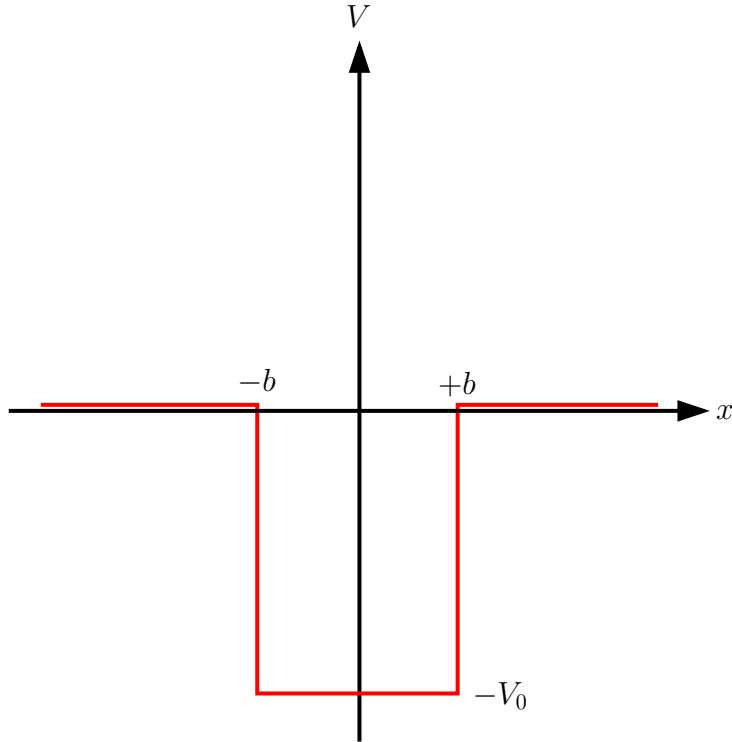


Abbildung 3: *Der Potentialtopf.*

#### 4.1 Bindungszustände mit gerader Parität

Wir beginnen mit der Suche nach Energieeigenwerten mit geraden Energieeigenfunktionen und betrachten zunächst die Möglichkeit, daß gebundene Zustände auftreten, also Energieeigenwerte  $E < 0$  existieren. Setzen wir wieder  $\epsilon = 2mE/\hbar^2$  und  $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$ , haben wir

$$\psi''(x) = \begin{cases} -(U_0 + \epsilon)\psi(x) & \text{für } |x| < b, \\ -\epsilon\psi(x) & \text{für } |x| \geq b. \end{cases} \quad (58)$$

Es ist weiter von vornherein klar, daß  $\epsilon \geq -U_0$  und also  $U_0 + \epsilon \geq 0$  sein muß. Da die Wellenfunktion gerade sein soll und im Unendlichen nicht exponentiell wachsen darf, ist die Lösung eindeutig durch

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} A_1 \exp(-\kappa_1|x|) & \text{für } |x| > b, \\ A_2 \cos(k_2x) & \text{für } |x| \leq b \end{cases} \quad (59)$$

mit  $\kappa_1 = \sqrt{-\epsilon}$  und  $k_2 = \sqrt{U_0 + \epsilon}$  gegeben. Die Wellenfunktion muß bei  $x = b$  mitsamt ihrer ersten Ableitung stetig sein. Das ergibt das homogene lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_1 \exp(-\kappa_1 b) - A_2 \cos(k_2 b) &= 0, \\ -A_1 \kappa_1 \exp(-\kappa_1 b) + A_2 k_2 \sin(k_2 b) &= 0 \end{aligned} \quad (60)$$

als Bedingung für die Konstanten  $A_1$  und  $A_2$ . Damit dieses Gleichungssystem von der trivialen Lösung  $A_1 = A_2 = 0$  verschiedene Lösungen haben kann, muß die Determinante der Koeffizien-



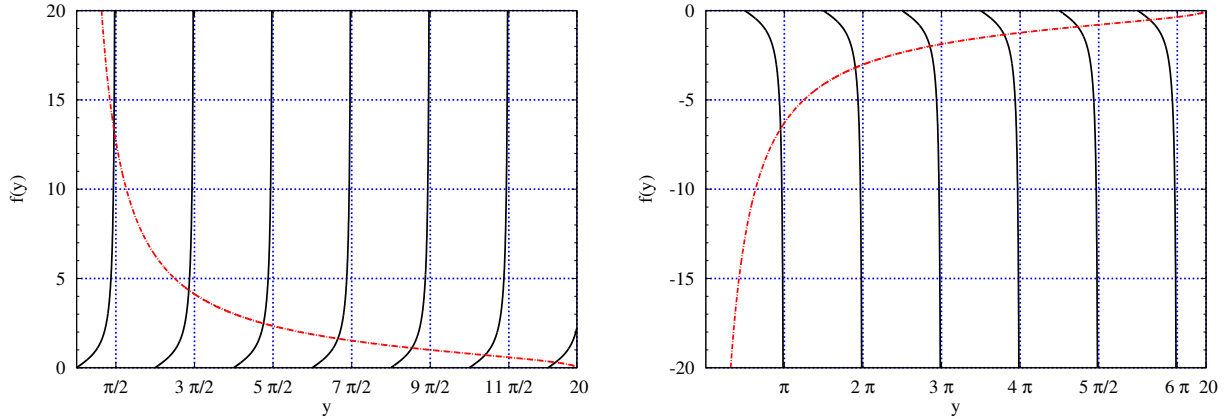


Abbildung 4: Zur graphischen Lösung der Eigenwertbestimmungsgleichungen für gerade (links) und ungerade Eigenfunktionen rechts, cf. Gln. (61) und (69).

tenmatrix verschwinden, und das führt nach ein paar einfachen Umformungen auf die Bedingung

$$\tan(k_2 b) = \frac{\kappa_1}{k_2}, \text{ d.h. } \tan(b\sqrt{U_0 + \epsilon}) = \sqrt{\frac{-\epsilon}{U_0 + \epsilon}}. \quad (61)$$

Die letzte Form der Gleichung zeigt, daß es sich um eine Bedingung an die Energieeigenwerte  $E = \hbar^2 \epsilon / (2m)$  handelt.

Diese Gleichung läßt sich nicht geschlossen lösen, aber wir können sie leicht graphisch analysieren. Dazu führen wir die neue Variable  $y = bk_2 = b\sqrt{-\epsilon}$  ein. Dann schreibt sich die Gleichung

$$\tan y = \sqrt{\frac{U_0 b^2 - y^2}{y^2}}. \quad (62)$$

Offenbar muß also  $0 < y < \sqrt{U_0 b^2}$  sein, und wir müssen untersuchen, wo Schnittpunkte zwischen den Graphen der Funktionen auf der linken und rechten Seite existieren. Deren  $y$ -Werte sind dann offenbar die gesuchten Lösungen. Betrachten wir dazu den linken Plot in Abb. 4.

Hier haben wir  $U_0$  und  $b$  gerade so gewählt, daß  $\sqrt{U_0 b^2} = 20$ . Wir werden diese Wahl für alle unten gezeigten Simulationen von Wellenpaketen beibehalten. In schwarz sind die positiven Zweige des Tangens aufgetragen in rot der Graph der Funktion auf der rechten Seite von Gl. (62). Da diese Funktion monoton fällt und für  $y \rightarrow 0$  divergiert, gibt es für jeden Wert von  $\sqrt{U_0 b^2}$  wenigstens einen Schnittpunkt (und also einen Energieeigenwert) mit dem Zweig des Tangens im Bereich  $y \in [0, \pi/2)$ . Weitere Eigenwerte sind möglich, wenn  $\sqrt{U_0 b^2}$  größer ist, und zwar gibt es genau einen Schnittpunkt mit jedem Zweig des Tangens, der im Definitionsbereich  $0 < y \leq \sqrt{U_0 b^2}$  liegt. Wie aus der allgemeinen Diskussion zu erwarten, sind also die Energieeigenwerte zu gebundenen Zuständen diskret.

Man überlegt sich leicht, daß die Anzahl der Energieeigenwerte mit geraden Eigenfunktionen

$$n_+ = \left[ \frac{\sqrt{U_0 b^2}}{\pi} \right] + 1 \quad (63)$$

ist, wobei  $[x]$  für die größte natürliche Zahl, die  $\leq x$  ist, steht. Dabei fällt die  $n$ -te Lösung ins Intervall

$$y_n \in [(n-1)\pi, (n-1/2)\pi), \quad n \in \{1, 2, \dots, n_+\}. \quad (64)$$

Damit lassen sich sämtliche Lösungen der Gleichung (61) numerisch mittels des Bisektionsverfahrens zuverlässig berechnen. Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind dann durch Lösung einer der beiden Gleichungen von (60) als die Funktion (59) gegeben:

$$A_1 = \exp(\kappa_1 b) \cos(k_2 b) A_2. \quad (65)$$

Da die Determinante für jeden Eigenwert verschwindet, ist dann die andere Gleichung von (60) automatisch ebenfalls erfüllt. Die Konstante  $A_2$  ist schließlich durch die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n^{(+)}(x)|^2 = 1 \quad (66)$$

bestimmt. Das Integral existiert mit Sicherheit, da die Wellenfunktionen im Unendlichen exponentiell abfallen. Nach Auswertung desselben gelangt man schließlich auf

$$A_2 = \left[ b + \frac{\cos^2(k_2 b)}{\kappa_1} + \frac{\sin(2k_2 b)}{2k_2} \right]^{-1/2}. \quad (67)$$

## 4.2 Bindungszustände mit ungerader Parität

Die Bindungszustände mit ungerader Wellenfunktion finden sich in ganz analoger Weise wie eben für die geraden Wellenfunktionen besprochen. Es gilt

$$\psi_n^{(-)}(x) = \begin{cases} B_2 \sin(k_2 x) & \text{für } |x| < b, \\ B_1 \operatorname{sign} x \exp(-\kappa_1 |x|) & \text{für } |x| \geq b. \end{cases} \quad (68)$$

Die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung bei  $x = b$  führt wieder auf ein homogenes lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten  $B_1$  und  $B_2$ . Damit nichttriviale Lösungen existieren, müssen wir wieder das Verschwinden der Koeffizientenmatrix verlangen. Dies führt nach Einführung der obigen Variablen  $y$  schließlich auf die Bestimmungsgleichung

$$\cot y = -\sqrt{\frac{U_0 b^2 - y^2}{y^2}}. \quad (69)$$

Analog zur Diskussion für die geraden Wellenfunktionen führt die Betrachtung des rechten Plots in Abb. 4 auf die Anzahl der Energieeigenwerte mit ungerader Energieeigenfunktion, nämlich

$$n_u = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sqrt{U_0 b^2} < \pi/2, \\ \left\lceil \frac{\sqrt{U_0 b^2}}{\pi} - \frac{1}{2} \right\rceil + 1 & \text{falls } \sqrt{U_0 b^2} \geq \pi/2. \end{cases} \quad (70)$$

Falls  $n_u \geq 1$  liegen die Lösungen für  $y$  stets in den Intervallen

$$y_n \in \left[ \frac{2n-1}{2}\pi, n\pi \right] \quad \text{für } 1 \leq n \leq n_u. \quad (71)$$

Auch hier ist wieder das numerische Auffinden aller Lösungen mit Hilfe der Bisektionsmethode problemlos möglich.

Für den  $y_n$  entsprechenden Energieeigenwert ergibt sich dann aus der Stetigkeits- und Normierungsbedingung für die Koeffizienten

$$B_1 = \exp(\kappa_1 b) \sin(k_2 b) B_2, \\ B_2 = \left[ b + \frac{\sin^2(k_2 b)}{\kappa_1} - \frac{\sin(2k_2 b)}{2k_2} \right]^{-1/2}. \quad (72)$$

### 4.3 Ungebundene Energieeigenzustände

Wir betrachten nun Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zu positiven Energieeigenwerten. Auch hier empfiehlt es sich, zur einfacheren Erfüllung der Stetigkeitsbedingungen, zunächst gerade und ungerade Lösungen aufzusuchen. Wie wir sehen werden, existieren jeweils beide Lösungen für alle Energieeigenwerte  $E > 0$ , was aufgrund unserer Diskussion des allgemeinen Falles zu erwarten war: Die Energieeigenwerte  $E > 0$  bilden das kontinuierliche Spektrum des Hamiltonoperators, und diese Eigenwerte sind zweifach entartet. Nur halbseitig ins Unendliche laufende Wellen gibt es im gegebenen Falle nicht, da die asymptotischen Werte des Potentials gleich sind.

Zugleich haben wir mit den beiden Lösungen zu gerader und ungerader Parität auch das vollständige (verallgemeinerte) Orthonormalsystem gefunden, wenn wir gemäß den oben entwickelten Vorschriften für die Normierung der ungebundenen Energieeigenzustände vorgehen. Es ist nämlich klar, daß Wellenfunktionen unterschiedlicher Parität stets orthogonal zueinander sind. Wir werden allerdings wie schon bei der Potentialstufe für unsere Simulationen lediglich die nach rechts laufenden Lösungen benötigen, die wir für jedes  $E > 0$  durch Linearkombination aus den Eigenzuständen mit definiter Parität erhalten werden.

Für **gerade Parität** besitzen die Lösungen offenbar die Form

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} A_2 \cos(k_2 x) & \text{für } |x| < b \\ A_1 \exp(ik_1|x|) + B_1 \exp(-ik_1|x|) & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (73)$$

mit  $k_1 = \sqrt{\epsilon}$ ,  $k_2 = \sqrt{U_0 + \epsilon}$ . Die Forderung, daß die Wellenfunktion und ihre Ableitung bei  $x = b$  stetig zu sein haben, ergibt für die Koeffizienten

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \exp(\mp ik_1 b) \frac{k_1 \cos(k_2 b) \pm ik_2 \sin(k_2 b)}{2k_1} A_2. \quad (74)$$

Für **ungerade Parität** haben wir

$$\psi_E^{(-)}(x) = \begin{cases} A'_2 \sin(k_2 x) & \text{für } |x| < b \\ \text{sign } x [A'_1 \exp(ik_1|x|) + B'_1 \exp(-ik_1|x|)] & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (75)$$

mit

$$\begin{pmatrix} A'_1 \\ B'_1 \end{pmatrix} = \exp(\mp ik_1 b) \frac{k_1 \sin(k_2 b) \mp ik_2 \cos(k_2 b)}{2k_1} A'_2. \quad (76)$$

Die Lösung, die nach rechts laufenden Wellen entspricht, d.h. diejenigen Eigenfunktionen, die  $\propto \exp(+ik_1 x)$  für  $x > b$  sind, ergibt sich daraus sofort durch die Linearkombination

$$\psi^{(R)}(x) = \left[ \frac{1}{B_1} \psi_E^{(+)}(x) - \frac{1}{B'_1} \psi_E^{(-)}(x) \right] A_R. \quad (77)$$

Setzen wir die Lösungen gemäß Gln. (73-76) ein, ergibt sich aus der Normierungsvorschrift (37) für den im Bereich  $x < -b$  nach rechts laufenden Anteil der Welle:

$$A_R = \sqrt{\frac{m}{8\pi k_1 \hbar^2}}. \quad (78)$$

Betrachten wir zunächst das asymptotische Verhalten der ungebundenen Lösungen, indem wir die wie bei der Schwelle definierten Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bestimmen. Dazu

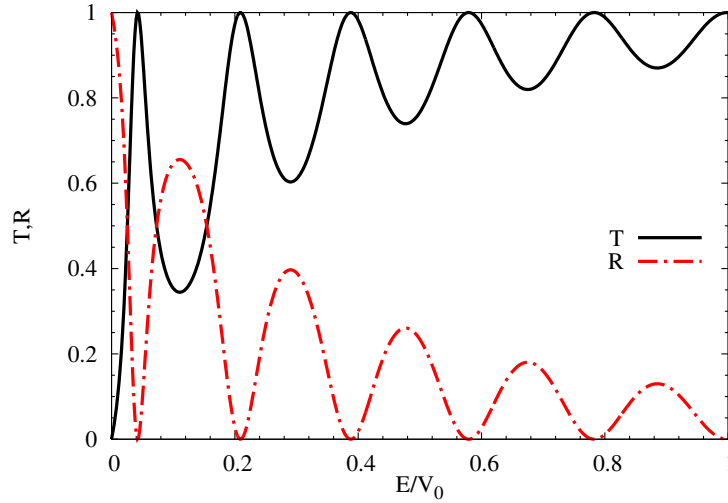


Abbildung 5: *Transmissions- und Reflexionskoeffizienten beim Potentialtopf.*

müssen wir nur die Koeffizienten für die entsprechenden Wellenanteile aus den eben hergeleiteten Gleichungen einsetzen. Nach ein wenig Algebra findet man

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(2bk_2)}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(2bk_2) + (k_1^2 + k_2^2) \sin^2(2bk_2)}, \\
 T &= \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(2bk_2) + (k_1^2 + k_2^2) \sin^2(2bk_2)}.
 \end{aligned} \tag{79}$$

Es gilt natürlich wieder  $T + R = 1$ , wie es sein muß.

Hier tritt ein gegenüber der Schwelle neues interessantes Phänomen auf: Der Reflexionskoeffizient verschwindet offenbar für diejenigen Energieeigenwerte, für die  $2bk_2 = n\pi$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ist. Entsprechend gilt für diese Energieeigenwerte  $T = 1$ , d.h. die Welle für diese speziellen Energieeigenwerte wird vollständig transmittiert. Dies ist ein typisches **Resonanzphänomen** (vgl. Abb. 5).

#### 4.4 Demonstration des Resonanzphänomens

Wir demonstrieren dies mit der Simulation eines Wellenpakets, das sich aus Wellen in einem recht engen Energiebereich um eine solche Resonanzschwelle herum zusammensetzt. Entsprechend ist dieses Wellenpaket im Ortsraum zwar relativ breit, aber man erkennt deutlich, daß für Zeiten relativ lang nach dem ersten Inkontakttreten des Wellenkopfes mit dem linken Rand des Potentialtopfes, fast die gesamte Intensität der Welle nach rechts läuft und kaum Anteile reflektiert werden, d.h. schickt man ein Teilchen mit einer Energie, die sehr genau auf eine „Resonanzenergie“ eingestellt ist, auf den Potentialtopf zu wird es mit einer Wahrscheinlichkeit sehr nahe von 1 durch den Topf hindurchlaufen und so gut wie nie reflektiert werden.

[Link zum Movie](#)

#### 4.5 Mittlere Energie: $E_0 = 0.24V_0$

Das typische Verhalten des Wellenpakets für eine mittlere Energie, die nicht in der Nähe einer Resonanz liegt, demonstrieren wir im folgenden Movie. Das von links einlaufende freie Gaußwellenpaket trifft auf den linken Rand des Potentialtopfes und wird dort teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Der transmittierte Anteil trifft auf den rechten Rand des Potentialtopfes und wird dort wieder teilweise reflektiert und teilweise transmittiert usw. Dadurch entstehen Minima und Maxima sowohl für den nach  $x < -b$  reflektierten und den nach  $x > b$  transmittierten Anteil des Wellenpakets.

[Link zum Movie](#)

#### 4.6 Überlagerung gebundener Zustände

Um eine Vorstellung über die Natur von Wellenpaketen zu erhalten, die sich aus der Überlagerung gebundener Zustände ergeben, simulieren wir schließlich noch einen anfang (ebenfalls näherungsweise Gaußförmig gewähltes) auf das Innere des Topfes konzentriertes Wellenpaket, das sich ausschließlich aus den gebundenen Zuständen zusammensetzt. Wie man aus Abb. 4 sieht, gibt es im gegebenen Falle  $n_g = 7$  gebundene Zustände mit positiver und  $n_u = 6$  mit negativer Parität. Das Wellenpaket besitzt also die folgende Gestalt

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{n_g} c_n^{(+)} \psi_n^{(+)}(x) \exp\left(-\frac{iE_n^{(+)}t}{\hbar}\right) + \sum_{n=1}^{n_u} c_n^{(-)} \psi_n^{(-)}(x) \exp\left(-\frac{iE_n^{(-)}t}{\hbar}\right). \quad (80)$$

Die Koeffizienten  $c_n^{\pm}$  wurden als die entsprechenden „verallgemeinerten Fourierkoeffizienten“ eines Gaußschen Wellenpakets  $\psi_0(x)$  bestimmt:

$$c_n^{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx [\psi_n^{\pm}(x)]^* \psi_0(x). \quad (81)$$

Freilich ist dann (80) für  $t = 0$  nicht genau das Gaußpaket  $\psi_0$ , da zu dessen exakter Entwicklung nach Energieeigenzuständen auch die ungebundenen Zustände beitragen würden. Wir wollen hier aber gerade den Fall eines ausschließlich aus gebundenen Zuständen zusammengesetzten Wellenpaketes studieren. Freilich haben wir das Wellenpaket (80) wieder auf 1 normiert.

[Link zum Movie](#)

Wie wir sehen, verhält sich ein solches Wellenpaket wie eine stehende Welle, die auch im Bereich  $|x| > b$  nicht strikt verschwindet, wohin ein klassisches Teilchen mit einer Energie  $E < 0$  aufgrund des Energieerhaltungssatzes nicht gelangen könnte. Dies ist wieder der bereits oben bei der Diskussion der Potentialstufe erwähnte quantenmechanische Tunneleffekt.

## Literatur

[GY03] K. Gottfried and T. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals*, Springer (2003).

[Mes99] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications, New York (1999).