2 Die Schrödinger-Gleichung

2.1 Aufstellen der Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist die Wellengleichung für Materiewellen, die nichtrelativistische Teilchen beschreiben. Sie wurde um 1923 von Erwin Schrödinger aufgestellt. Die Gleichung ist nicht herleitbar, sondern kann nur plausibel gemacht werden und muß dann im Experiment bestätigt werden. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung liefern

- die Wellenfunktionen $\Psi(\vec{r}, t)$ des Teilchens
- und die möglichen Energien E.

Nichtrelativistischer Energiesatz:
Die Gesamtenergie ist die Summe aus kinetischer Energie T und potentieller Energie V:

$$E = T + V(x,t) \qquad T = \frac{m}{2}v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Wir betrachten wieder den einfachsten Fall einer Materiewelle, eine ebene Welle in x-Richtung $\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ und bilden die Ableitung nach der Zeit und die zweite Ortsableitung:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\,\Psi \qquad \Longrightarrow E = +i\hbar\,\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\,\frac{1}{\Psi}$$
$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \qquad \Longrightarrow p^2 = -\hbar^2\,\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\,\frac{1}{\Psi}$$

Wir vergleichen dieses Resultat mit dem Energiesatz $E = T + V = p^2/2m + V$ und erhalten die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

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

Offenbar gilt folgende Zuordnung für Energie und Impuls:

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \vec{p} \to -i\hbar\,\mathrm{grad} = -i\hbar\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Eigenschaften der Schrödinger-Gleichung:

- es tritt nur die einfache Ableitung nach der Zeit auf, im Gegensatz zur Schwingungsgleichung
- komplexe Differentialgleichung, daher sind auch die Lösungen komplex
- lineare, homogene Differentialgleichung und somit gilt das Superpositionsprinzip:
  wenn Ψ_1 und Ψ_2 Lösungen sind, dann ist auch $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ eine Lösung

Die Schrödinger-Gleichung beschreibt nichtrelativistische Probleme. Ihre Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit den Beobachtungen an Teilchen und Teilchensystemen (Atome, Moleküle, Kerne,...).

Bei vielen Problemen hängt das Potential nur vom Ort und nicht von der Zeit ab: $V = V(x)$. In diesen Fällen läßt sich die Gleichung vereinfachen, indem man die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion abspaltet: $\Psi(x,t) = \phi(x)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \phi(x)\xi(t)$. Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ergibt:

$$i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\phi(x)\xi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2}\right)\xi(t) + V(x)\,\phi x\xi(t)$$
$$E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\,\phi(x)$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + [E - V(x)]\;\phi(x) = 0$$

Für den allgemeinen, dreidimensionalen Fall erhält man die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung zu (mit der Abkürzung $\Delta\Phi(\vec{r}) = \frac{\partial^2\phi(\vec{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi(\vec{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi(\vec{r})}{\partial z^2}$):

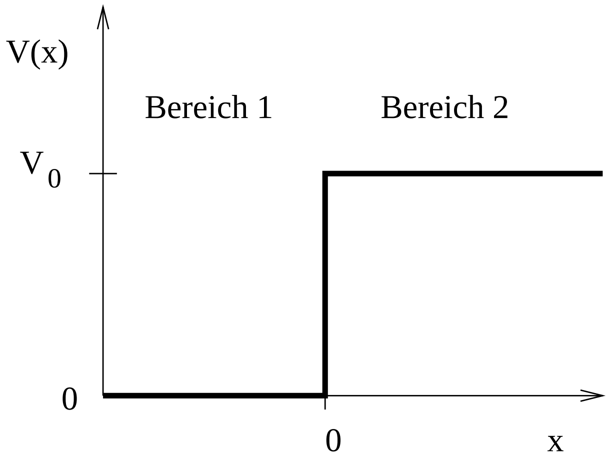
$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + (E - V)\,\phi = 0}$$

2.2 Der Tunneleffekt

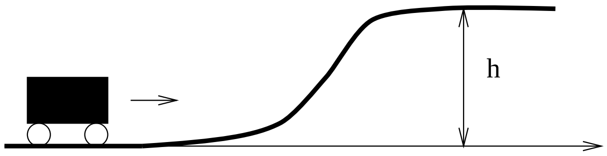
Wir behandeln jetzt Beispiele für die Anwendung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. Daher betrachten wir nur zeitliche konstante Potentiale und den Ortsanteil der Wellenfunktion $\phi(x)$.

Potentialstufe

Bereich 1 $(-\infty < x < 0)$ $V_1 = 0$
Bereich 2 $(0 \leq x < +\infty)$ $V_2 = V_0$
Ein Teilchen (Wellenpaket) mit dem Impuls p und der Masse m bewege sich auf die Potentialstufe zu.



Das klassische Analog ist ein Körper der Masse m und der kinetischen Energie T, der reibungsfrei gegen eine Erhebung rollt. Um hinaufzukommen, muß seine kinetische Energie T ausreichen, um den Unterschied der potentiellen Energie zu überwinden $T = \frac{p^2}{2m} > V_0 = mgh$.



Im klassischen Fall kann der Körper für $T < V$ niemals die Potentialstufe überwinden. In der Quantenmechanik ist dies mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit möglich!

Bereich 1

$E = T_1 + V_1 \Rightarrow T_1 = \frac{p_1^2}{2m}$

Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + E\phi = 0$$

Bereich 2

$E = T_2 + V_2 = T_2 + V_0 \quad \Longrightarrow T_2 = \frac{p_2^2}{2m} = E - V_0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + (E - V_0)\phi = 0$$

Lösung der Differentialgleichung:

Die Gleichung $\dfrac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + \alpha\phi = 0$ hat die Lösungen $\phi = A\mathrm{e}^{\pm i\sqrt{\alpha}x}$ und die allgemeine Lösung ist $\phi = A\mathrm{e}^{+i\sqrt{\alpha}x} + B\mathrm{e}^{-i\sqrt{\alpha}x}$.
Für reelle Werte von $\sqrt{\alpha}$ ist die physikalische Bedeutung der allgemeinen Lösung die Überlagerung einer ebenen Welle in $+x$-Richtung und einer ebenen Welle in $-x$-Richtung, also eine einlaufende und eine reflektierte Welle.
Durch Vergleich mit der Schrödinger-Gleichung erhalten wir für die beiden Bereiche:

$$\alpha_1 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p_1^2}{\hbar^2} = k_1^2 \qquad \alpha_2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = \frac{p_2^2}{\hbar^2} = k_2^2$$

I.) Wir betrachten zunächst den Fall $E > V_0$, d.h. $\alpha_2 > 0$ und $\sqrt{\alpha_2}$, p_2 und k_2 sind reell

$$\phi_1 = A\mathrm{e}^{+ik_1x} + B\mathrm{e}^{-ik_1x} \qquad \phi_2 = C\mathrm{e}^{+ik_2x} + D\mathrm{e}^{-ik_2x}$$

$D = 0$ weil es hier keine rücklaufende Welle geben kann!

$$\phi_2 = C\mathrm{e}^{+ik_2x}$$

Die Konstanten A, B, C werden durch Stetigkeitsbedingungen ermittelt:

$$\begin{aligned}
&\phi_1(x=0) = \phi_2(x=0) && \Longrightarrow A + B = C \\
&\frac{\partial\phi_1}{\partial x}(x=0) = \frac{\partial\phi_2}{\partial x}(x=0) && \Longrightarrow ik_1A - ik_1B = ik_2C \qquad \Longrightarrow A - B = \frac{k_2}{k_1}C \\
&B = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)A \qquad C = \left(\frac{2k_1}{k_1+k_2}\right)A
\end{aligned}$$

Lösung:

$$\phi(x) = \begin{cases} A\left(\mathrm{e}^{+ik_1x} + \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{-ik_1x}\right) & x \le 0 \\ \text{einlaufend} \qquad \text{reflektiert} & \\ & \\ A\frac{2k_1}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{+ik_2x} & x > 0 \\ \text{durchgehend} & \end{cases}$$

Für $V_0 = 0$ gilt $k_1 = k_2$ und es gibt keine Reflexion. Wie zu erwarten läuft die Welle ungestört weiter. Für $V_0 > 0$ tritt stets eine reflektierte Welle auf.

Der Koeffizient A wird durch Normierung der Wellenfunktion bestimmt:

$$\int \mathrm{d}V\,|\phi(x,y,z)|^2 = \iiint \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,|\phi(x,y,z)|^2 = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum anzutreffen, ist gleich 1. Für unser eindimensionales Problem wäre also:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\,|\phi(x)|^2 = 1$$

II.) Jetzt diskutieren wir den quantenmechanisch interessanten Fall $E < V_0$. Die Lösung für $x < 0$ ändert sich nicht, aber $\alpha_2 < 0$. Damit wird $\sqrt{\alpha_2} = k_2$ imaginär. Wir setzen $\sqrt{\alpha_2} = i\kappa$, sodaß κ reell ist, und erhalten:

$$\phi_2(x) = C\mathrm{e}^{+ik_2x} = A\frac{2k_1}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{+ik_2x} = A\frac{2k_1}{k_1+i\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa x}$$

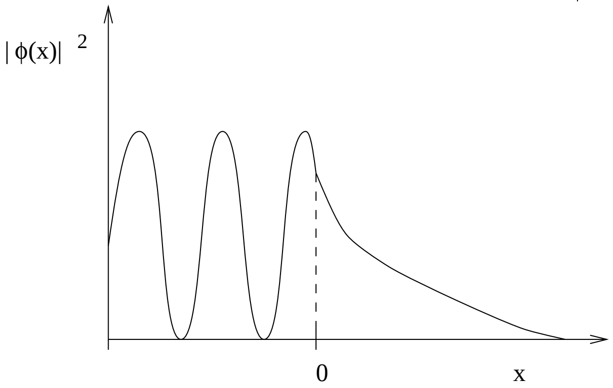
Offenbar dringt die Welle in die Potentialstufe ein. Für die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich $x > 0$ ergibt sich

$$|\phi_2(x)|^2 = \phi^*(x)\phi(x) = |A|^2 \left|\frac{2k_1}{k_1+k_2}\right|^2 \mathrm{e}^{-2\kappa x} = |A|^2 \left|\frac{2k_1}{k_1+i\kappa}\right|^2 \mathrm{e}^{-2\kappa x} = |A|^2 \frac{4k_1^2}{k_1^2+\kappa^2}\mathrm{e}^{-2\kappa x}$$

Mit $\kappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$ erhält man für $x > 0$:

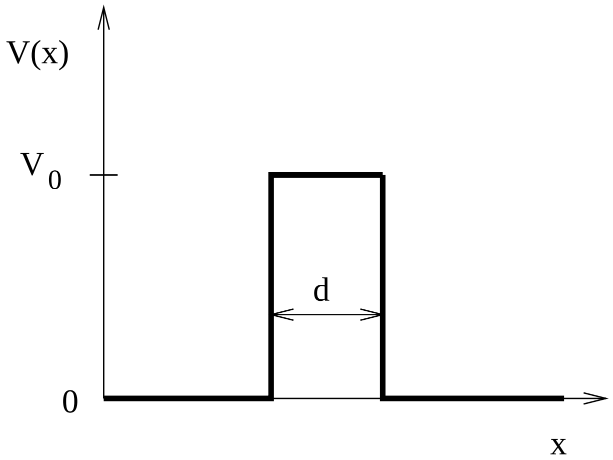
$$|\phi_2(x)|^2 = |A|^2 \frac{4E}{V_0}\,\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\,x} > 0$$

Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\phi_2(x)|^2$ für $V_0 > E$:



Im Bereich der Potentialstufe fällt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell ab. Die Eindringtiefe ist $1/\kappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$. Die Eindringwahrscheinlichkeit hängt vom Verhältnis E/V_0 ab.
Vor der Potentialstufe bildet sich eine stehende Welle aus.

Ergänzung der Potentialstufe zum Potentialwall:



Klassisch kann das Teilchen für $E < V_0$ die Potentialbarriere V_0 nicht durchdringen. Das Beispiel der Potentialstufe zeigt aber, daß ein Eindringen in den Potentialwall erlaubt ist. Daher ist auch ein Fortschreiten der Welle jenseits der Barriere zuzulassen, d.h. wir erwarten, daß das Teilchen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit den Potentialwall durchdringen kann. Beachte: die Unschärferelation lässt für eine kurze Zeit die Verletzung des Energiesatzes zu: $\Delta E\,\Delta t = \hbar$

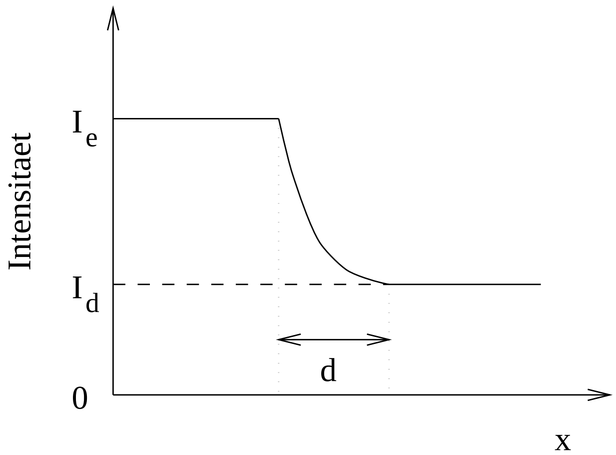
Die Rechnung erfolgt analog zur Potentialstufe: aufteilen in 3 Bereiche und benutzen der Stetigkeitsbedingungen an den Rändern der Barriere.

Ergebnis der Rechnung:

Die Intensität der durchgelassenen Welle fällt exponentiell mit der Wallbreite und der Differenz $V_0 - E$ ab. Man erhält für das Verhältnis der einlaufenden I_e und durchgelassenen I_d Intensitäten

$$\frac{I_d}{I_e} \propto \mathrm{e}^{-2\kappa d} = \mathrm{e}^{-2\frac{d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

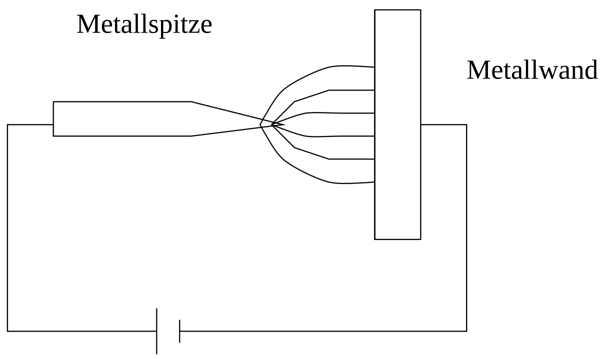
(für $\kappa d \gg 1$, d.h. große Wallbreite)

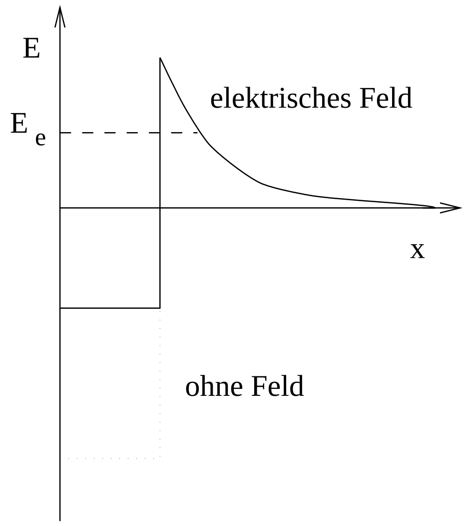


$\Longrightarrow$ Teilchen mit der Energie E können eine Potentialbarriere $V_0 > E$ durchdringen (durchtunneln).

Beispiele für den Tunneleffekt

a) Feldemission von Elektronen aus einer Metallspitze





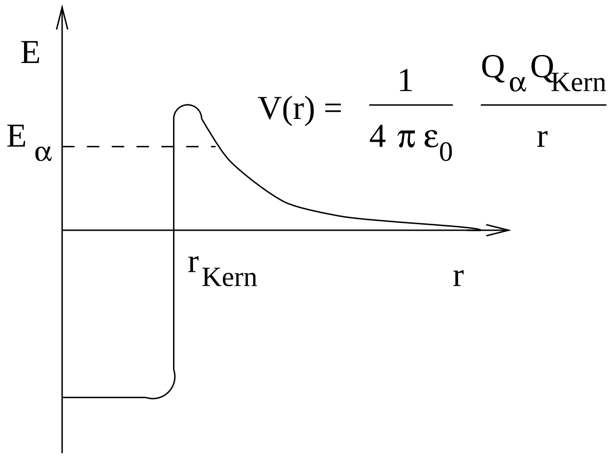
Die Elektronen sind in der Metallspitze gebunden (Potentialtopf). Durch Anlegen einer äußeren Spannung entsteht eine Potentialbarriere, die von den Elektronen durchtunnelt werden kann, so dass sie die Metallspitze verlassen können.
Anwendung: Rastertunnelmikroskop

b) α-Zerfall schwerer Kerne
Ein α-Teilchen ist der Kern eines Heliumatoms und besteht aus zwei Protonen und zwei Neutronen (genauere Erklärung später). Dieser Kern ist besonders stabil. Viele schwere, instabile Kerne zerfallen durch Aussenden eines α-Teilchens, z.B.

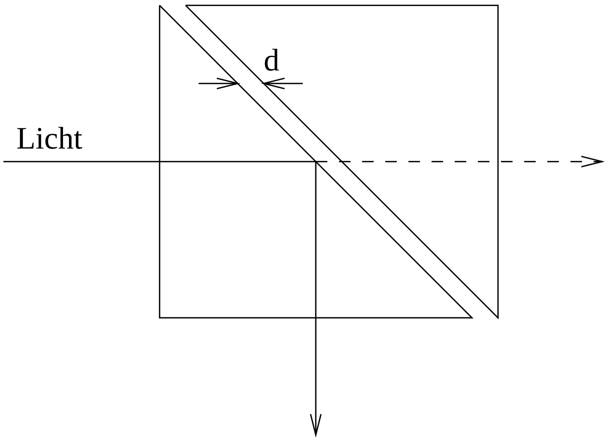
$$\begin{array}{llll} {}^{238}U & \longrightarrow & {}^{234}Th + \alpha & T_\alpha = 4,18 MeV \quad \tau_{1/2} = 4.5 \cdot 10^9 Jahre \\ {}^{212}Po & \longrightarrow & {}^{208}Pb + \alpha & T_\alpha = 8.78 MeV \quad \tau_{1/2} = 0.3 \mu s \end{array}$$

Die kinetische Energie der α-Teilchen T_α ist sehr ähnlich, aber die Lebensdauer der Kerne ist sehr unterschiedlich und variiert über viele Größenordnungen. Der Tunneleffekt liefert die Erklärung, siehe z.B. J.W. Rohlf für eine quantitative Rechnung:

Im Kern können sich α-Teilchen aus den Kernbausteinen (Protonen oder Neutronen) bilden. Auf Grund der anziehenden Kernkräfte befindet sich das α-Teilchen in einem Potentialtopf. Außerhalb des Kerns gibt es ein Coulomb-Potential (abstoßende elektrische Kräfte). Die Tunnelwahrscheinlichkeit, und damit die Zerfallswahrscheinlichkeit des Kerns hängt exponentiell von der Energie der α-Teilchen E_α ab!



c) Klassischer Tunneleffekt in der Optik



Der Tunneleffekt ist eine Konsequenz des Wellencharakters. Es gibt ihn auch in der Optik:
Licht wird in einem Prisma totalreflektiert. Nähert man ein zweites Prisma, so wird Licht durchgelassen, sobald der Abstand in die Größenordnung der Wellenlänge λ kommt, also $\frac{d}{\lambda} \approx 1$ oder $dk \approx 1$. Vergleiche mit dem Term κd im quantenmechanischen Fall.

2.3 Quantisierung der Energie

Wir betrachten das Beispiel eines Teilchens, das sich nur im Bereich $0 \leq x \leq a$ aufhalten soll. Außerhalb soll die Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0 sein. Das können wir durch folgendes Potential erreichen:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & sonst \end{cases} \qquad \text{Potentialkasten}$$

Die stationäre Schrödinger-Gleichung im Bereich $0 \leq x \leq a$ lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + [E - V(x)]\phi(x) = 0 \Longrightarrow \frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}E\phi(x) = 0$$

Mit der Abkürzung $k^2 = \frac{2m}{\hbar}E$ lautet die allgemeine Lösung:

$$\phi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$$

Randbedingungen: wegen $|\phi(x)|^2 = 0$ für $x < 0$ und $x > a$ gilt:
a) $\phi(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0$

Eingesetzt: $\boxed{\phi(x) = A(\mathrm{e}^{ikx} - \mathrm{e}^{-ikx}) = 2iA\sin(kx)}$

b) $\phi(a) = 0 \Rightarrow 2iA\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi, n = 1, 2, 3, ...$
$n = 0$ ist nicht möglich, da dann gilt: $k = 0$ und $\phi(x) = 0$ für alle x!

$\Longrightarrow$ Nur die Wellenzahlen $\boxed{k_n = \frac{\pi}{a}n,\ n = 1, 2, 3, ...}$ sind erlaubt!

Die möglichen Energiewerte sind:

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

Die minimal mögliche kinetische Energie des Teilchens ist <u>nicht</u> Null!
Durch die Ortsbeschränkung (Heisenberg) ist der minimale Energiewert

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}$$

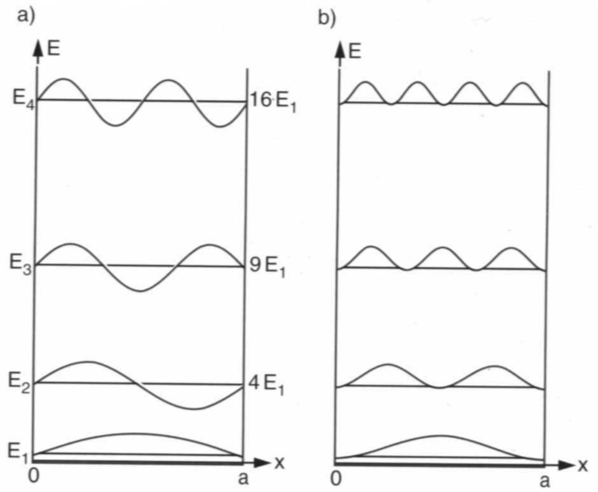


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. **(a)** Wellenfunktionen, **(b)** Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E,x)\,\mathrm{d}x = |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x$ des Teilchens