Quantenmechanik im quasiklassischen Grenzfall:
Die WKB-Methode

Ausarbeitung des Vortrags im Zuge des Seminars
„Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie“

Tim Kessens

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung

Die WKB-Methode ist ein Verfahren, um die Lösung der eindimensionale zeitunabhängige Schrödingermethode zu erhalten. Diese ist besonders gut geeignet für gebundene Zustände und Tunneleffekte. Inspiriert ist jene Methode durch folgendes Szenario:

Ein Teilchen der Energie E fliegt durch ein Gebiet mit dem konstantes Potential $V(x)$. Bei $E>V$ nimmt die Wellenfunktion bekanntermaßen eine oszillierende Form mit konstanter Wellenlänge λ und Amplitude A an. Wenn man jetzt annimmt das sich das Potential doch ändert, aber so langsam, dass viele Wellenlängen durchlaufen werden, ohne das eine Änderung spürbar ist, kann man die Form der Wellenfunktion nach wie vor als oszillierend annehmen. Dennoch wird die Wellenfunktion durch das sich ändernde Potential in dem Maße beeinlusst beeinflusst, dass die Wellenlänge und die Amplitude variieren.[1]

Im Folgenden sollen also sowohl die Funktionsweise des Verfahrens anhand der Herleitung und einigen typischen quantenmechanischen Problemen als auch der Erkenntnisgewinn durch die WKB-Methode anhand einer historischen Anwendung, gezeigt werden. Des Weiteren soll noch ein Ausblick auf die Problematik der Methode in der Nähe klassischer Umkehrpunkte gegeben werden.

1 Vgl. Griffiths, David J.: *Quantenmechanik*. 2. Auflage. München: Pearson 2012. S. 356

2. Herleitung

Die Betrachtung der Herleitung der WKB-Näherung liefert tiefere Einblicke in die Funktionsweise und die Physikalische Deutung der WKB-Methode. Der Ausgangspunkt ist die zeitunabhängige eindimensionale Schrödingergleichung.[2]

$$\frac{\hbar}{2\mathrm{m}}\frac{d^2\Psi}{dx^2}=(V(x)-E)\Psi \tag{1.1}$$

Diese wird nun mithilfe des Impulses p ausgedrückt

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}=\frac{-p^2}{\hbar^2}\Psi \tag{1.2}$$

$$\text{mit}\quad p\equiv\sqrt{2\mathrm{mE}-V(x)} \tag{1.3}$$

Es wird angenommen, dass die Schrödingergleichung durch eine allgemeine Welle gelöst wird.[3]

$$\Psi=A(x)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\Phi(x)} \tag{1.4}$$

Wobei die Amplitudenfunktion $A(x)$ und die Winkelfunktion $\Phi(x)$ noch zu bestimmen sind. Diese Annahme ergibt in die Schrödingergleichung eingesetzt dann jeweils eine Differentialgleichung für Real- und Imaginärteil, wobei sich aus der Lösung letzterer für die Amplitudenfunktion $A(x)$ folgende Beziehung ergibt:[4]

$$A=\frac{C}{\sqrt{\Phi'}} \tag{1.5}$$

Die Amplitudenfunktion ist dementsprechend von einer beliebigen gegebenenfalls komplex Konstanten C und der Winkelfunktion Φ abhängig. Aus dem Realteil hingegen ergibt sich eine kompliziertere Differentialgleichung, die analytisch so nicht lösbar ist. [5]

$$\hbar^2\frac{A''}{A}=\Phi'^2-p^2 \tag{1.6}$$

2 Vgl. Sakurai, J.J. und J. Napolitano: *Modern Quantum Mechanics.* 2. Auflage. San Francisco: Pearson/Addison-Wesley 2011. S.111

3 Vgl. Grifftiths, *Quantenmechanik* S. 357

4 Vgl. Schwabl, F.: *Quantenmechanik*. 4.Auflage. Berlin: Springer 1990. S. 184

5 Vgl. Grifftiths, *Quantenmechanik* S. 358f

Zur Lösung wird der linke Term der Gleichung als 0 genähert. Dementsprechend kann die Differentialgleichung zu

$$\Phi=\pm\int p(x)dx \tag{1.7}$$

gelöst werden. Für die Wellenfunktion ergibt sich durch das Einsetzen der gefundenen Beziehungen für die Amplituden- und Winkelfunktionen und durch die Superposition der möglichen Lösungen die Form:[6]

$$\Psi\simeq\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left(C_1\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx}+C_2\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx}\right) \tag{1.8}$$

Dies ist nun eine allgemeine Lösung der Schrödingergleichung, die durch die Wahl der Konstanten und der Integrationsgrenzen auf das zu behandelnde Problem angepasst werden kann. Die Näherung in Gleichung 1.5 lässt sowohl $\hbar=0$ oder $A''\ll A$ als Interpretation zu. $\hbar=0$ ist dann eine gute Näherung, wenn die Quantisierung der Energie nicht mehr ins Gewicht fällt, also jene sich quasi-kontinuierlich ändert. Dies ist im Bereich großer Quantenzahlen der Fall. Da für große Quantenzahlen die Quantenmechanik mit der klassischen Mechanik korrespondiert, wird diese Annahme auch quasiklassische Näherung genannt.[7]

Die Annahme $A''\ll A$ gilt für sich langsam verändernde Amplituden der Wellenfunktion und beschreibt einen Bereich in dem sich das Potential im Bereich mehrerer Wellenlängen kaum bis gar nicht verändert.[8] Dies ist meist nicht an allen Stellen des Potentials der Fall und führt zu Komplikationen. Darauf wird im Kapitel Potenzialbarrieren nochmals genauer eingegangen. Bemerkenswerterweise wurden bis hier hin noch keine Annahmen über die Form des Potentials selbst gemacht. Dieses fließt nämlich ausschließlich über den Impuls $p(x)$ ein.

3. Gebundene Zustände E<V

Ein typisches Problem in der Quantenmechanik ist der unendlich tiefe Potentialtopf mit vertikalen Wänden. Hierbei bietet es sich an die Eulerschen Funktionen der Wellenglei-

6 Vgl. Schwabl. *Quantenmechanik* S.185

7 Vgl. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* S.115f

8 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik* S.356

chung in trigonometrische Funktionen umzuschreiben.[9]

$$\Psi \simeq \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left(C_S \sin \frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')dx' + C_C \cos \frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')dx'\right) \tag{2.1}$$

Dadurch ergibt sich mithilfe der Randbedingungen:

- Aus $\Psi(0)=0$ folgt $C_C=0$
- Aus $\Psi(a)=0$ folgt $\int_0^a p(x')dx = n\pi\hbar$

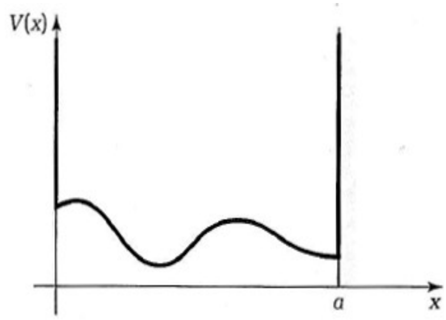

Abbildung 1: Potentialtopf mit beliebigen Boden

Somit hat sich das Problem auf ein einziges Integral reduziert, denn durch das lösen dieses einen Integrals ist es möglich die Energieeigenwerte zu bestimmen. Erst an dieser Stelle wird die Beschaffenheit des Bodens berücksichtigt.

A Ebenes Innenpotetial

Zunächst wird einfachste Fall, des ebenen Bodens betrachtet. Hierbei ist das Innenpotential $V=0,$ sodass der Impuls konstant ist.

$$\int_0^a \sqrt{2\mathrm{mE}}\, dx = n\pi\hbar \tag{2.2}$$

$$\rightarrow \quad E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mathrm{m}a^2} \tag{2.3}$$

Die WKB-Methode liefert also vor den unendlich tiefen Potentialtopf mit ebenen Boden das aus der herkömmlichen Rechnung bekannte exakte Ergebnis.[10]

B Gestuftes Innenpotential

Zusätzlich wird nun ein leicht komplizierteres Innenpotential mit 'Stufe' angenommen. Die Randbedingungen sind dieselben, sodass sich nur der Integrand p ändert.

$$\int_0^{\frac{a}{2}} \sqrt{2\mathrm{m}(E-V_0)}\, dx + \int_{\frac{a}{2}}^a \sqrt{2\mathrm{mE}}\, dx = n\pi\hbar \tag{2.4}$$

9 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik* S.358f

10 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik* S.360

Abbildung 1 nach: Griffiths, *Quantenmechanik* S.360

$$\rightarrow \quad \sqrt{E-V_0}+\sqrt{E}=\frac{2\mathrm{n}\pi\hbar}{\sqrt{2\mathrm{m}}a}\equiv b_n \tag{2.5}$$

$$\rightarrow \quad E=\frac{b_n^2}{4}+\frac{V_0}{2}+\frac{V_0^2}{b_n^2} \tag{2.6}$$

In Rückbesinnung auf den semi-klassischen Geltungsbereichsbereich der WKB-Methode lässt sich auf Grund der großen Quantenzahlen $V_0 \ll b_n$ annehmen, sodass sich für die Energieeigenwerte

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mathrm{ma}^2}+\frac{V_0}{2} \tag{2.7}$$

Dies ist ebenfalls ein Ergebnis, welches durch eine anderes Modell überprüfen lässt. In diesem Fall stimmt das mit der WKB-Methode gefundene Ergebnis mit demjenigen aus der Störungstheorie überein. Die Störungstheorie nimmt eine 'kleine Stufenhöhe' V_0 an, sodass ebenfalls $V_0 \ll b_n$ gegeben ist.[11]

Insgesamt liefert die WKB-Methode gute und in den hier betrachteten Fällen sogar analytisch exakte Energieeigenwerte. Der Vorteil dieser Methode liegt jedoch in der einfachen Variation der betrachteten Probleme. Die Eigenschaften des Potentials werden sukzessiv eingearbeitet, sodass es möglich ist den letzten Schritt rückgängig zu machen und durch einen auf eine andere Beschaffenheit zugeschnitten Schritt zu ersetzen. Dementsprechend lassen sich die Energieeigenwerte für Potentialtöpfen mit beliebigen Böden mithilfe des einen Integrals über den Impuls p errechnen, ohne die Schrödingergleichung immer wieder erneut lösen zu müssen.

4. Tunneleffekte E<V

Ein weiteres elementares Phänomen der Quantenmechanik ist das Tunneln eines Teilchens durch einen klassisch verbotenen Bereich. Eine einlaufende Wellenfunktion trifft auf eine Potenzialbarriere und teilt sich in eine reflektierte und eine transmittierte Welle.

A Die Wellenfunktion außerhalb des Potentials

Diese freien Teilchenwellen außerhalb des Potentials sind durch die WKB-Methode wie auch durch die Lösung der Schrödingergleichung gleichwertig bestimmbar. Für ein von links einfallendes Teilchen gilt für die Wellenfunktion links der Barriere:

11 Vgl. Griffiths, Q*uantenmechanik* S.360

$$\Psi_{links} = A\,e^{\frac{i}{\hbar}px} + B_{reflektiert}\,e^{-\frac{i}{\hbar}px} \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{2mE} \tag{3.1}$$

Dies ist die Summe aus der einlaufenden Welle der Amplitude A und der reflektierten Welle mit der Amplitude B. Das Minus im Exponenten bestimmt an dieser Stelle die Ausbreitungsrichtung der Welle.[12]

Die durch die Barriere transmittierte Welle bildet sich analog.

$$\Psi = B_{transmittiert}\,e^{\frac{i}{\hbar}px} \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{2mE} \tag{3.2}$$

Das Verhältnis zwischen der einlaufenden und der transmittierten Welle und damit die Wahrscheinlichkeit des Teilchen die Barriere beim Aufprall zu durchtunneln wird durch den Transmissionskoeffizienten charakterisiert:

$$T = \frac{|B_{transmittiert}|^2}{|A|^2} \tag{3.3}$$

B Die Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich

Der klassisch verbotene Bereich erstreckt sich zwischen den beiden klassischen Umkehrpunkten. Das sind jene Punkte, an dem sich die Beziehung von $E > V$ zu $E < V$ umkehrt. Bei der betrachteten Potentialbarriere sollen dies die Stellen 0 und a sein. Da in diesem Bereich $E < V$ ist p rein imaginär, sodass die Wellenfunktion eine rein reelle Form annimmt.

$$\Psi \simeq \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\left(C\,e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x')|dx'} + D\,e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x')|dx'}\right) \tag{3.4}$$

Diese setzt sich nun aus einem exponentiell steigendem und einem exponentiell fallendem Teil zusammen. Je höher oder breiter die Barriere ist desto geringer sind die Werte für C, bis es für unendlich hohe oder breite Barrieren schließlich null wird. Demzufolge lässt sich die Form der Gesamtwellenfunktion qualitativ wie in Abbildung 2 darstellen.

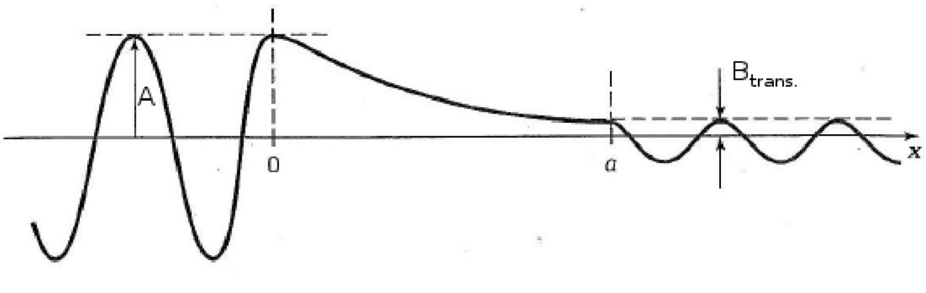

Abbildung 2: Qualitative Darstellung der Gesamtwellenfunktion

12 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik* S.356

Abbildung 2 nach Griffiths, *Quantenmechanik* S.356

Warum lediglich qualitativ? Die Quantitative Betrachtung versagt mit der gefundenen Wellenfunktion ausgerechnet in der Nähe der Umkehrpunkte. Normalerweise würde man mithilfe der Anschlussbedingungen an eben jenen Stellen die Konstanten bestimmen, aber in der Nähe der Umkehrpunkte ist $E \simeq V$ gegeben sodass das der Impuls $p(x)$ im Nenner des Vorfaktors $\frac{1}{\sqrt{p(x)}} = \frac{1}{\sqrt{2\mathrm{m}(E-V)}}$ gegen null läuft und somit die Amplitude explodiert. Eine rapide gegen unendlich strebende Amplitude widerspricht sowohl dem tatsächlichen Verhalten der exakten Wellenfunktion[13], als auch der Annahme der sich langsam verändernden Amplituden, was in der Herleitung bei der Näherung angenommen worden ist. Die bisherige genäherte Form der Wellengleichung ist also in der Nähe der Umkehrpunkte nicht in der Lage die tatsächliche Wellenfunktion abzubilden.

5. Gamow's Theorie des Alphazerfalls

Ist es dennoch möglich die WKB-Methode für Potenzialbarrieren produktiv einzusetzen? 1928 machte George Gamow die quantenmechanische Erkenntnisse für Alphazerfallsprozesse in der Kernphysik nutzbar. Es war bereits bekannt wie das Potential des Urankerns aussah (siehe Abb. rechts) und ebenfalls das die gemessene Energie des emittierten Alphateilchens wesentlich geringer, war als die Barriere die es überwunden haben musste.[14]

$$V = -V_0 \quad \text{für} \quad r < r_1 \qquad (4.1)$$

$$V = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \quad \text{sonst} \qquad (4.2)$$

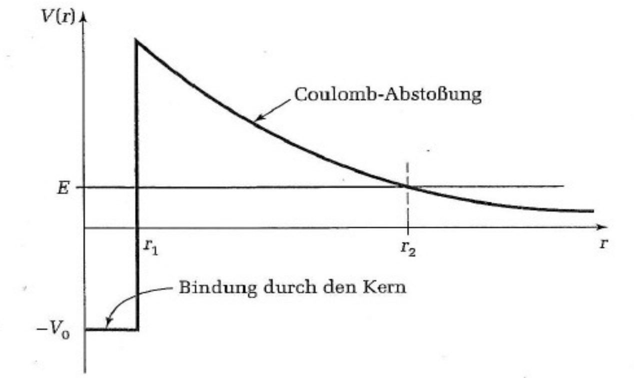

Abbildung 3: Schematisches Potential eines Atomkerns

Die Überwindung wird nun als Tunnelprozess aufgefasst, dessen Transmissionskoeffizient T sich näherungsweise proportional zum exponentiell abfallenden Teil der Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich verhält:

13 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik S.367*

14 Abbildung 3 nach Griffiths, *Quantenmechanik S.363*

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \simeq e^{-2\gamma} \tag{4.3}$$

Dabei handelt es sich bei γ um den sogenannten Gamowfaktor:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x')| dx' \tag{4.4}$$

Die linke Umkehrpunkt ist offensichtlich r_1, während für den rechten Umkehrpunkt

$$\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r_2} = E \tag{4.5}$$

gilt, sodass sich für den Gamowfaktor gilt:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2\mathrm{m}\left(\frac{2\mathrm{Ze}^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} - E\right)} dx = \frac{\sqrt{2\mathrm{mE}}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1}\, dr \tag{4.6}$$

Nach der Lösung des Integrals durch Substitution ergibt sich:

$$\gamma \simeq \frac{\sqrt{2\mathrm{mE}}}{\hbar} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{r_1 r_2}\right) = K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z r_1} \tag{4.7}$$

$$K_1 \equiv \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}} \frac{\pi\sqrt{2\mathrm{m}}}{\hbar} = 1{,}980\, MeV^{\frac{1}{2}} \tag{4.8}$$

$$K_2 \equiv \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}} \frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1{,}485\, fm^{-\frac{1}{2}} \tag{4.9}$$

Die Teilchen im Kern sind laut des Fermigasmodell frei beweglich, sodass sich ein zwei Protonen und zwei Neutronen sich zufällig zu einem Alphakern zusammenfindet und gegen die Potentialbarriere stoßen. Bei jedem Stoß besteht die mithilfe des Gamowfaktors bestimmbare Wahrscheinlichkeit des Tunnelns. Demenstrechend ergibt sich für die Emissionswahrscheinlichkeit:

$$p_{Emission} = \frac{v}{2\mathrm{r}_1} e^{-2\gamma} \tag{4.10}$$

Zwar ist die Geschwindigkeit mit der sich die Teilchen im Kern bewegen unbekannt, aber dessen Spielraum ist verschwindend klein im Vergleich zu dem Exponentialfaktor, der über bis zu 25 Größenordnungen variiert. Daraus ist die mittlere Lebensdauer bestimmbar zu circa:

$$\tau = \frac{2\mathrm{r}_1}{v} e^{2\left(K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Z r_1}\right)} \tag{4.11}$$

6. Zusammenfassung

Es konnte gezeigt werden, wie die WKB-Näherung bei verschiedenen quantenmechanischen Problemen angewendet werden kann und dort - zumindest in guter Näherung- zum gesuchten Ergebnis führt. Es würde aber auch eine Schwachstelle der Methode festgestellt, wo die Anwendung der WKB-Näherung in der Nähe klassischer Umkehrpunkte ohne Weiteres nicht zur Lösung führt. Dieser Umstand konnte auf die Näherungsannahmen zurückgeführt und verortet werden, sodass es sich nicht um ein unerklärliches Phänomen handelt, sondern auch dieses Problem umgehen werden kann. Tatsächlich besteht die Möglichkeit mit sogenannten Verbindungsgleichungen eben jene kritischen Stellen zu überbrücken und auch dort zufriedenstellende Ergebnisse zu erhalten.[15] Abschließend wurde die WKB-Methode und ihr Nutzen historisch am Beispiel der Theorie Gamows zum Alphazerfall aufgezeigt.

15 Vgl. Griffiths, *Quantenmechanik S.367ff*

6. Anhang

A. Literaturverzeichnis

Schwabl, F.: *Quantenmechanik.* 4.Auflage. Berlin: Springer 1990.

Grifftiths, David J.: *Quantenmechanik*. 2. Auflage. München: Pearson 2012.

Sakurai, J.J. und J. Napolitano: *Modern Quantum Mechanics*. 2. Auflage. San Francisco: Pearson/Addison-Wesley 2011.

B. Antiplagiatserklärung

Erklärung des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit über

Quantenmechanik im quasiklassischen Grenzfall:
Die WKB-Methode

selbstständig verfasst habe, und dass ich keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt habe und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

....

Ort, Datum Unterschrift