

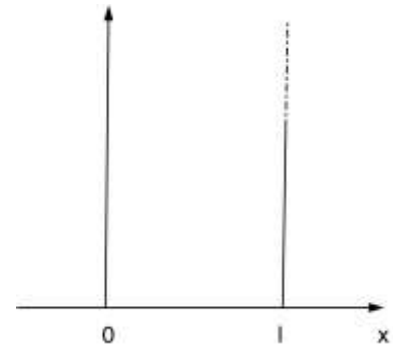
Lehrplananbindung: 12.2 Zeitunabhängige, eindimensionale Schrödingergleichung als quantenphysikalische Grundgleichung

Kompetenzen: Neben den Fachkenntnissen liegt der Schwerpunkt bei

Erkenntnisgewinnung	Fachmethoden wiedergeben	Fachmethoden nutzen	Fachmethoden problembezogen auswählen u. anwenden
Kommunikation	Mit vorgegebenen Darstellungsformen arbeiten	Geeignete Darstellungsformen nutzen	Darstellungsformen selbstständig auswählen u. nutzen
Bewertung	Vorgegebene Bewertungen nachvollziehen	Vorgegebene Bewertungen beurteilen und kommentieren	Eigene Bewertungen vornehmen

Einsetzen der Wellenfunktionen des unendlich hohen Potentialtopfs in die Schrödingergleichung

Sucht man die möglichen Wellenfunktionen für ein quantenmechanisches System, so kann man diese stets durch Lösen der Schrödingergleichung zu den gegebenen Bedingungen finden. Dies ist allerdings meist nicht einfach und oftmals auch nur mit Hilfe numerischer Verfahren zu schaffen. Vergleichsweise einfach ist die Situation an einem eindimensionalen (linearen) Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. In dieser Aufgabe sollen Sie die Herangehensweise exemplarisch nachvollziehen.



- a) Die stationäre Schrödingergleichung lautet in ihrer allgemeinen Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E \Psi(x) \quad (1)$$

Leiten Sie her und begründen Sie, dass für den linearen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden die Schrödingergleichung im Innenbereich die Form

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + E \Psi(x) = 0 \quad (2)$$

hat.

- b) Begründen Sie ohne eine Rechnung, warum die Wellenfunktion im Außenbereich die Form $\Psi(x) = 0$ haben muss und warum sich dort keine Schrödingergleichung angeben lässt.
- c) Begründen Sie, warum die Lösungen für den unendlich hohen Potentialtopf im Inneren die Form $\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ mit $n \in \mathbb{N}$ haben.
- d) Setzen Sie die Wellenfunktionen aus der Teilaufgabe c) in die Schrödingergleichung ein und zeigen Sie, dass sich ein Elektron nur mit ganz bestimmten Energiewerten im Potentialtopf aufhalten kann. Kontrollergebnis: $E_n = \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2$ mit $n \in \mathbb{N}$
- e) Geben Sie die Wellenfunktion für $n = 1, 2, 3$ explizit an und skizzieren Sie diese in einem Diagramm. Zeichnen Sie die zu den einzelnen Lösungen zugehörigen Energieniveaus in obigen Potentialtopf bei geeigneter Skalierung der Hochwertachse ein.

Lösung:

- Im Innenbereich hat man das Potential $V(x) = 0$. Setzt man dies in die allgemeine Schrödingergleichung (1) ein, so erhält man sofort (2).
- Im Außenbereich gilt $V(x) = \infty$. Daher kann man für in diesem Bereich keine sinnvolle Schrödingergleichung mehr angeben. Da das Teilchen unendlich viel Energie brauchen würde, um vom Innenbereich in den Außenbereich zu gelangen, ist seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit dort 0.
- Die Materiewelle des Teilchens ist im Inneren des Potentialtopfs eine stehende Welle. Da das Teilchen nicht wie in b) diskutiert in die Wände des Potentialtopfs eindringen kann, hat seine Wellenfunktion an den beiden Rändern des Topfs jeweils einen Knoten. Es kommen also nur stehende Wellen ganz bestimmter Wellenlängen in Frage, nämlich $\lambda_n = \frac{2l}{n}$, $n \in \mathbb{N}$.

Damit ergibt sich für die stehende Welle: $\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right) = A \sin\left(\frac{2\pi}{2l} x\right) = A \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right)$.

$$\begin{aligned} \text{d) } \Psi(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right) \\ \Psi'(x) &= A \frac{n\pi}{l} \cos\left(\frac{n\pi}{l} x\right) \\ \Psi''(x) &= -A \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right). \end{aligned}$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung (2) liefert:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} A \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right) + E A \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right) &= 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 + E &= 0 \\ \Leftrightarrow E &= \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2 \end{aligned}$$

Die obigen Wellenfunktionen $\Psi_n(x)$ lösen die Schrödingergleichung also nur unter der Bedingung $E_n = \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2$. Demnach kann sich ein Elektron nur mit diesen, ganz bestimmten Energiewerten im Potentialtopf aufhalten.

e)

$$\begin{aligned} n=1: E_1 &= \frac{\hbar^2}{8ml^2} & \text{und} & \quad \Psi_1(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases} \\ n=2: E_2 &= \frac{\hbar^2}{8ml^2} 2^2 & \text{und} & \quad \Psi_2(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{2\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases} \\ n=3: E_3 &= \frac{\hbar^2}{8ml^2} 3^2 & \text{und} & \quad \Psi_3(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{3\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

