



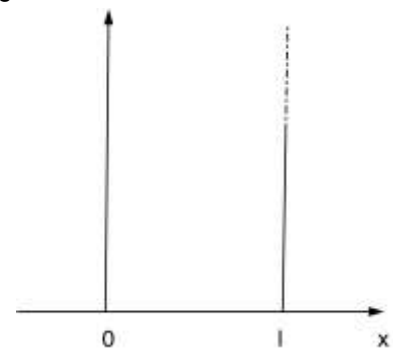
Lehrplananbindung: 12.2 Zeitunabhängige, eindimensionale Schrödingergleichung als quantenphysikalische Grundgleichung

Kompetenzen: Neben den Fachkenntnissen liegt der Schwerpunkt bei

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

Vertiefung: Berechnungen am Potentialtopf mit Hilfe der 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) Weil die Schrödingergleichung (2) sowohl die zweite Ableitung der Funktion ψ als auch die Wellenfunktion ψ selbst enthält, ist ein Lösungsansatz unter Verwendung der Sinus- oder Kosinus-Funktion sinnvoll, da für deren zweite Ableitung $[\sin(x)]'' = -\sin(x)$ bzw. $[\cos(x)]'' = -\cos(x)$ gilt. Ermitteln Sie durch Rechnung die möglichen Werte des Parameters k , für die der Ansatz $\psi(x) = A \sin(kx)$ die Schrödingergleichung (2) im Innenbereich des Topfes löst und geben Sie die Wellenfunktion ψ an.

$$\text{Kontrollergebnis: } \psi(x) = \begin{cases} A \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

d) Geht man nun von der Annahme aus, dass es sich bei der Lösung der Schrödingergleichung um eine stetige Funktion, also um eine Funktion handeln muss, die nirgendwo einen Sprung machen darf, so kommt man an den Stellen des Übergangs vom Innen- zum Außenbereich des Topfes zu den Bedingungen $\psi(0) = 0$ und $\psi(l) = 0$. Zeigen Sie, dass diese beiden Bedingungen nur

für die diskreten Energiewerte $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2$ erfüllt sind ($n \in \mathbb{N}$).

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.

- f) Es bleibt die Amplitude A in den Lösungen der Teilaufgabe c) zu ermitteln. Hierzu nutzt man die Tatsache, dass sich das Elektron mit der Wahrscheinlichkeit 1 im Potentialtopf befinden muss, d. h. es muss z. B. für $n = 1$ die Gleichung $\int_0^l \left(A \sin\left(\frac{\pi}{l}x\right) \right)^2 dx = 1$ gelten. Erläutern Sie, warum der Integrand das Quadrat der Wellenfunktion beinhaltet.

Lösung:

- a) Im Innenbereich hat man das Potential $V(x) = 0$. Setzt man dies in die allgemeine Schrödingergleichung ein, so erhält man sofort (2).
- b) 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 null.

c)

$$Y(x) = A \sin(kx)$$

$$Y'(x) = Ak \cos(kx)$$

$$Y''(x) = -Ak^2 \sin(kx)$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} (-Ak^2 \sin(kx)) + EA \sin(kx) = 0$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} k^2 + E = 0$$

$$\Leftrightarrow k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2}}$$

(Anmerkung: Die negative Lösung für k führt zu keinen neuen Wellenfunktionen, wie man in Aufgabe d) schnell nachvollziehen kann, und wird daher der Vereinfachung halber weggelassen.)
Damit gilt für die Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2}} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases}$$

d) $\Psi(0) = 0 \Rightarrow A \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2}} \cdot 0\right) = 0$ (immer erfüllt)

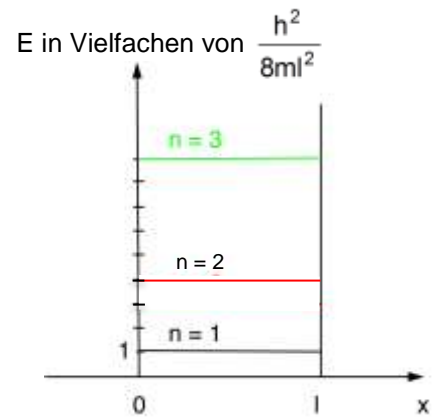
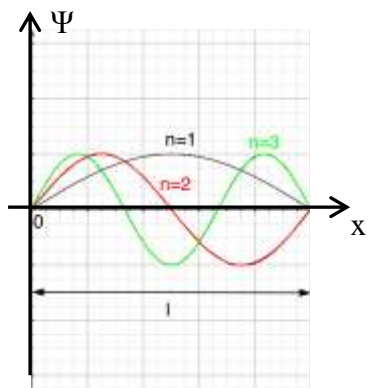
$$\Psi(l) = 0 \Rightarrow A \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2}} \cdot l\right) = 0 \Rightarrow \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2}} \cdot l = n\pi \quad (n \in \mathbb{N}, \text{ da die linke Seite positiv ist}).$$

Umformen nach E liefert: $E_n = \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2$

e) $n = 1: E_1 = \frac{\hbar^2}{8ml^2} \rightarrow \Psi_1(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases}$

$$n = 2: E_2 = \frac{\hbar^2}{8ml^2} 2^2 \rightarrow \Psi_2(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{2\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases}$$

$$n = 3: E_3 = \frac{\hbar^2}{8ml^2} 3^2 \rightarrow \Psi_3(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{3\pi}{l} x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{für sonst} \end{cases}$$



- f) Das Produkt aus dem Betragsquadrat der Wellenfunktion (Wahrscheinlichkeitsdichte) und einem infinitesimal kleinen Raumbereich dx beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in diesem Raumbereich. Das hier behandelte Problem ist eindimensional. Demnach ist $\left(A \sin\left(\frac{\pi}{l}x\right) \right)^2 dx$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Elektron im Bereich $[x, x+dx]$ „anzutreffen“.