

# Die Zustandsfunktion

---

Übersicht	24
Vorgehen	24
2.1 Präludium - Experimente mit Licht geben Rätsel auf	25
Lernziele von Kapitel 2	27
2.2 Differentialgleichungen - ein intuitiver Zugang	28
2.3 Die Schrödingergleichung bestimmt die Zustandsfunktion	31
2.4 Quantisierung der Energie	37
2.5 Die Rolle des Drehimpulses	42
2.6 Elektronen im Festkörper	46
Lösungen zu den Aufgaben	51

---

## Übersicht

Hier werden die theoretischen Grundlagen des Tunnelmikroskops behandelt. Dieses Kapitel ist anspruchsvoll. Dies liegt daran, dass die bis anhin diffusen Begriffe von Quantenobjekt, Wellen und Wahrscheinlichkeiten in einen mathematisch-physikalischen Rahmen gesetzt und dadurch klarer werden sollen: Zentral ist die Schrödingergleichung. Sie wird in 2.3 eingeführt. Um sie zu verstehen, müssen Sie vorgängig in Abschnitt 2.2 noch ein bisschen Mathematik hinzulernen oder repetieren (Stichwort Differentialgleichungen). Damit verschaffen Sie sich Zugang zur eigentlichen Quantenmechanik (2.4 – 2.5) und knüpfen in 2.6 die Verbindung zu Festkörpern. Im Additum 2 wird dann näher auf Atomspektren eingegangen und die Verbindung zur Chemie hergestellt.

## Vorgehen

Beginnen Sie mit den Phänomenen im experimentellen Teil. Studieren Sie dann die Lernziele. Falls Sie einfache Differentialgleichungen schon lösen können, überfliegen Sie das Kapitel 2.2 nur kurz. Für verschiedene Aufgaben benötigen Sie einen grafikfähigen Taschenrechner oder einen Computer, auf welchem Sie Mathematikprogramme laufen und die Resultate zeichnen lassen können. - Viel Vergnügen!

## 2.1 Präludium -

## Experimente mit Licht geben Rätsel auf

Wenn wir mit Licht einer bestimmten Wellenlänge auf eine wässrige Lösung einstrahlen, so erwarten wir, dass das Licht mit derselben Wellenlänge wieder austritt. Es erscheint uns auf den ersten Blick unnatürlich, wenn wir z.B. mit blauem Licht hineinstrahlen und rotes Licht herauskommt. Trotzdem kennen Sie wahrscheinlich solche Beispiele: Vielleicht erinnern Sie sich an einen Disco-Besuch oder an eine Zirkusvorstellung, wo mit sogenanntem "*Schwarzlicht*" - das unsere Augen nicht wahrnehmen kann - phantastische Farbeffekte hervorgezaubert werden. Das gleiche Phänomen wird auch in Mineraliensammlungen benützt: Beleuchtet man einen Fluorit-Kristall mit UV-Licht, so leuchtet er. Das lieferte auch den Namen "Fluoreszenz".

Dies ist eine der vielen Überraschungen, die die Natur bereithält und die Quantenphysik erklärt. Ein kleines Experiment soll Ihnen dies zeigen. Lesen Sie zuerst, worum es geht, dann führen Sie das Experiment durch:



### Experiment 2.1: Zur Fluoreszenz

Im Nebenzimmer finden Sie drei Lösungen in Reagenzgläsern. Löschen Sie das Licht. Wenn Sie nun die Gläser unter die UV-Lampe halten, beginnen diese Lösungen zu leuchten. - Welche Farben sehen Sie?

Bestrahlen Sie nun die Proben mit der weissen Lampe oder mit einer UV-Lampe einer anderen Wellenlänge und mit einer IR-Lampe. - Was stellen Sie jetzt fest?

In allen Fällen - ausser mit der IR-Lampe - leuchteten die bestrahlten Lösungen unabhängig vom einfallenden Licht in der jeweils gleichen Farbe. Offenbar wird von jeder Flüssigkeit nur Licht mit bestimmten Wellenlängen ausgesandt. Diese *Wellenlängen* sind von Stoff zu Stoff verschieden. Mit der IR-Lampe nun werden die Lösungen mit langwelligem Licht bestrahlt. Dieses scheint nicht auszureichen, um den Stoff zum Fluoreszieren anzuregen. Doch warum leuchtet in diesem Fall die Lösung nicht einfach schwächer?

Sie wissen, dass einem Photon der Wellenlänge  $\lambda$  die Energie  $E$  zugeordnet wird:  $E = hc/\lambda$ . Ein Photon mit einer Wellenlänge im UV-Bereich ist kurzwellig und besitzt somit eine grosse Energie. Licht aus derartigen Photonen kann das Auge nicht wahrnehmen. Aber Sie sehen ja, wie die Lösung unter der UV-Lampe leuchtet! Also muss doch das kurzwellige UV-Photon in der Lösung so umgewandelt werden, dass ein Photon mit sichtbarer Wellenlänge die Lösung verlässt. Energetisch gesprochen: Die grosse *Energie  $E$  des einfallenden Photons* wird durch ein Atom oder Molekül der Lösung in einzelne Portionen umgewandelt  $E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots$

Diese kleineren Energien werden als neue Photonen wieder ausgesandt, wobei mindestens eine Energieportion, z.B.  $E_1$ , einem Photon mit sichtbarer Wellenlänge entspricht. Die anderen liegen im infraroten Bereich. Da die Farbe der fluoreszierenden Lösung unabhängig von der Energie des UV-Photons und jede Farbe einer bestimmten Energie zugehörig ist, muss also wenigstens die Portion  $E_1$  für das sichtbare Photon in jeder Umwandlung vorhanden sein.

Mit diesen Überlegungen fällt es leicht zu erklären, weshalb einfallendes IR-Licht kein Leuchten erzeugt: Ein IR-Photon besitzt schlichtwegs zuwenig Energie, die in Portionen zerlegt werden könnte, von denen dann eine ein sichtbares Photon erzeugte. Doch das Rätsel

bleibt: Wie zerlegt ein Atom oder Molekül die Energie eines einfallenden Photons in immer dieselben Portionen und sendet diese als neue Photonen wieder aus? Kurz:

*Weshalb tritt die Energie bei atomaren Prozessen in Portionen auf?*

Zur Vertiefung des Verständnisses dieser Problematik untersuchen Sie im folgenden Gase mit einem Spektrometer. Sie wissen aus der Optik: ein Prisma zerlegt Licht in sein Farbspektrum. Jeder Farbe entsprechen Photonen einer bestimmten Wellenlänge. Nach dem Prisma oder Spektrometer sehen Sie also das Spektrum aller Photonen, die zusammen das einfallende Licht bilden.



### Experiment 2.2: Zum Spektrum von Gasen

Sie untersuchen mit einem Spektrometer das Licht von Gasen, welche Sie durch Anlegen einer Hochspannung zum Leuchten bringen. Beobachten Sie:

- a) Neon und Argon (wie in Leuchtreklamen)
- b) Quecksilber und Natrium (von der Strassenbeleuchtung her vertraut)
- c) Wasserstoff, Stickstoff und Kohlendioxid

Die Edelgase sowie Quecksilber und Natrium weisen ein deutliches *Linienpektrum* auf. Diese Gase senden somit nur Photonen bestimmter Wellenlängen aus. Wiederum stellt sich die Frage, warum die Energie der ausgestrahlten Photonen nur *diskrete* Werte annehmen kann. ("Diskret" steht hier als Gegensatz zu "kontinuierlich". Diskret sind auch die natürlichen Zahlen im Gegensatz zu den kontinuierlichen, dicht liegenden, reellen Zahlen.)

Die Moleküle unter c) zeigen ein viel dichteres Spektrum. Anscheinend gibt es für die Moleküle wesentlich mehr Möglichkeiten, Photonen bestimmter Wellenlänge auszusenden. Beim Kohlendioxid z.B. liegen die Energien so dicht beieinander, dass die einzelnen Linien zu Streifen verschmelzen. (Ein Spektrometer höherer Auflösung würde dies offenbaren.) Ein solches Spektrum wird *Bandenspektrum* genannt. Wie diese entstehen, wird in Additum 2 besprochen werden.

Um diese Erscheinungen im Rahmen der Quantenphysik erklären zu können, sind Ihre Mathematikkenntnisse gefordert. Sie werden zuerst eingeführt in die Theorie der Differentialgleichungen - allerdings in einer sehr "eingängigen" und kurzgefassten Art. Der kleine mathematische Apparat stellt Ihnen Möglichkeiten zur Verfügung, in die Welt der Quantenobjekte einzutauchen und einige phantastische Resultate zu erreichen. So entwickelt sich Ihre Quantenphysik zu einer *Quantenmechanik*. Dazu streben wir folgende Lernziele an:

## Lernziele von Kapitel 2

- Sie können dem Begriff "*Zustandsfunktion*" eine präzise Bedeutung geben.
- Sie kennen den Zusammenhang zwischen der Zustandsfunktion eines Quantenobjektes und der *Schrödingergleichung*. In einfachen Fällen können Sie die Schrödingergleichung *lösen*.
- Sie verstehen, weshalb die *Energie eines gebundenen Quantenobjekts quantisiert* ist. Die Rolle der Randbedingungen leuchtet Ihnen ein. Sie können damit das Auftreten von Spektrallinien begründen.
- Sie wissen, wie man Elektronen im Festkörper durch das Bändermodell beschreiben kann.
- Mit Hilfe des Bändermodells können sie den Unterschied zwischen Leitern, Halbleitern und Isolatoren erklären.

## 2.2 Diff.gleichungen - ein intuitiver Zugang

Zum Einstieg betrachten wir einen vertrauten Aufgabentypus:  $3x^2 + 2 = 5x$ , wobei  $x$  eine reelle Zahl aus dem Intervall  $[0, 0.75]$  sein soll. Die Gleichung und die angegebene Grundmenge bestimmen, welche Bedingungen  $x$  zu erfüllen hat. Die Lösung ist nur  $x = \frac{2}{3}$ ; die andere Variante  $x = 1$  liegt nicht in der Grundmenge. Man kontrolliert durch Einsetzen.

Bei einer Differentialgleichung ist nun *die Unbekannte* nicht einfach eine Zahl  $x$ , sondern *eine Funktion*  $f(x)$  aus einer Grundmenge von vielen Funktionen. Neben der gesuchten Funktion  $f(x)$  tauchen in einer Differentialgleichung aber auch noch deren Ableitungen auf. In Worten lautet eine der einfachsten Differentialgleichungen so: "Welche Funktion ergibt einmal abgeleitet wieder dieselbe Funktion?" Dies können wir mathematisch formulieren:  $f'(x) = f(x)$ . Nun, die Lösungsfunktion ist hier  $f(x) = e^x$ ; denn leiten wir  $e^x$  einmal nach  $x$  ab, so erhalten wir wiederum  $e^x$ .

*Beispiel:* "Welche Funktion aus der Menge aller ableitbaren Funktionen erfüllt die Differentialgleichung  $f'(x) = -3f(x)$ ?" Versuchen wir es mit  $f(x) = e^{-3x}$ . Differenzieren wir einmal nach  $x$ , so ergibt sich wegen der inneren Ableitung  $f'(x) = -3e^{-3x} = -3f(x)$ . Also ist diese Wahl, im Mathematikerjargon: "dieser *Ansatz*"  $f(x) = e^{-3x}$  richtig.

Vielleicht haben Sie oben bemängelt, dass die Lösungsfunktionen noch mit einer reellen Zahl  $A$  multipliziert werden können und immer noch Lösungsfunktionen bleiben. Da haben Sie recht:

$f'(x) = f(x)$  wird durch  $f(x) = Ae^x$  und  $f'(x) = -3f(x)$  durch  $f(x) = Ae^{-3x}$  gelöst. Diese Zahl  $A$  wird als Amplitude bezeichnet.



### Aufgabe 2.1: Lösungsansätze für Differentialgleichungen

Erraten Sie die Lösungen der folgenden Differentialgleichungen:

Nr. 1  $f'(x) = 2 \cdot f(x)$

Nr. 4  $x \cdot f'(x) = 3f(x)$

Nr. 2  $f'(x) = 2x \cdot f(x)$

Nr. 5  $f''(x) = 9f(x)$

Nr. 3  $f'(x) = -x \cdot f(x)$

Nr. 6  $f''(x) = -f(x)$

Bei den letzten beiden Aufgaben haben Sie festgestellt, dass es je zwei Lösungen gibt:

Nr. 5  $f(x) = Ae^{3x}$

und

$f(x) = Be^{-3x}$ ,

Nr. 6  $f(x) = A \sin(x)$

und

$f(x) = B \cos(x)$ .

Die beiden Teillösungen können je zu einer Gesamtlösung addiert werden, wobei natürlich die beiden Amplituden  $A$  und  $B$  nicht gleich sein müssen:

Nr. 5'  $f(x) = Ae^{3x} + Be^{-3x}$ ,

Nr. 6'  $f(x) = A \sin(x) + B \cos(x)$ . (Beachten Sie die Wirkung des Minuszeichens!)

Sie stellen fest, dass die Lösungsfunktion nicht vollständig bestimmt ist: wer legt die konstanten Vorfaktoren  $A$  und  $B$  und damit den genauen Funktionsverlauf fest? Eine *eindeutige Lösung* ist nur möglich, wenn zusätzlich zur Differentialgleichung noch andere Bedingungen für  $f(x)$  gegeben sind: sogenannte Rand- oder Anfangsbedingungen (wenn  $x$  die Zeit bedeutet).

*Beispiel:* Wir gehen von Nr. 6 aus und verlangen zusätzlich: Die Schwingungsfunktion  $f(x)$  soll bei  $x = 0$  beginnen, dort am Rand a) Null sein, dh.  $f(0) = 0$ , und b) eine Steigung von 2 besitzen, dh.  $f'(0) = 2$ .

Die erste Bedingung führt auf  $B = 0$ . Wir verwenden folglich nur noch  $f(x) = A \sin(x)$ . Diese können wir in die zweite Bedingung einsetzen, wobei  $f'(x) = A \cos(x)$  ist:  $f'(0) = A \cos(0) = A$ , dh. also  $A = 2$ . Die eindeutige Lösung der Differentialgleichung  $f'(x) = -f(x)$  mit den beiden Bedingungen lautet somit:  $f(x) = 2 \sin(x)$ .



### Aufgabe 2.2: Berücksichtigen der Randbedingungen

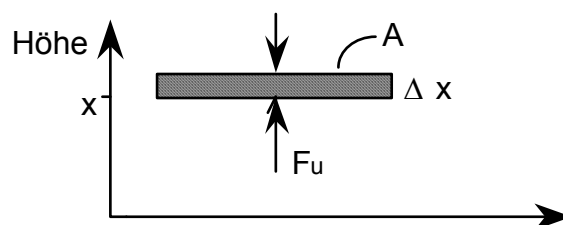
- Berechnen Sie die eindeutige Lösung der Differentialgleichung Nr. 5  $f'(x) = 9 \cdot f(x)$  für die beiden Randbedingungen:  
1)  $f(0) = 10$  und 2)  $f(0) = -24$ . Hinweis: Der TR zeigt die Lösungsfunktion sehr schön für  $x = [0; 1.2]$ ,  $y = [0; 25]$ .
- Weisen Sie nach, dass die Lösungsfunktion Nr.6 auch in der Form einer phasenverschobenen Cosinusfunktion geschrieben werden kann:  $f(x) = C \cos(x + \delta)$ . Formen Sie dazu  $f(x)$  um; setzen Sie  $B = C \cos \delta$  und  $A = -C \sin \delta$ . Wie gross sind  $C$  und  $\delta$ ?

### Ein physikalisches Beispiel:

Stellen Sie sich eine Atmosphärenphysikerin vor, die unbedingt wissen will, wieviel der *Luftdruck*  $p(x)$  in nicht allzu grosser Höhe  $x$  über dem Erdboden beträgt. Sie stellt drei Überlegungen an:

- Die Luft ist ein Gas. Deshalb gilt die Zustandsgleichung für ideale Gase  $pV = NkT$ . In der Höhe  $x$  ist also  $p(x) = n(x)kT$ , wobei  $n(x)$  die Teilchendichte in der Höhe  $x$  darstellt. Die Temperatur wird dabei als konstant angenommen, was nicht realistisch ist.
- Zwischen den einzelnen Luftschichten herrscht ein Kräftegleichgewicht. Sie betrachtet ein kleines Volumen  $\Delta V = A \Delta x$  in der Höhe  $x$ . Auf die Fläche  $A$  wirkt von unten die "Trag"kraft  $F_u = p(x)A$  - von oben wirkt einerseits das Gewicht  $F_G = m_{\text{Luft}} g n(x) A \Delta x$  und andererseits die Druckkraft auf die Oberseite  $F_o = p(x + \Delta x)A$  (Siehe Fig.1;  $m_{\text{Luft}}$  = Masse eines "Luftteilchens"). Es gilt also  $F_u = F_G + F_o$ . Diese Gleichung kann umgeformt werden zu:

$$\frac{p(x + \Delta x) - p(x)}{\Delta x} = -m_{\text{Luft}} g \cdot n(x)$$



Figur 2.1

- Linkerhand entsteht für ein infinitesimal kleines  $\Delta x$  ein Differentialquotient. Zudem kann man  $p(x)$  durch  $n(x)kT$  ersetzen. Die Differentialgleichung lautet dann:

$$\frac{d}{dx} n(x) = -\frac{m_{\text{Luft}} g}{kT} n(x) = n'(x) \quad (2.1)$$

Die Lösung kennen Sie bereits: es ist eine Exponentialfunktion. Mit der Randbedingung, dass die Teilchendichte am Erdboden gleich der Zahl  $n_0$  sei, dh für die Bedingung  $n(0) = A = n_0$ , ergibt sich:

$$p(x) = n(x) \cdot kT \Rightarrow p(x) = n_0 kT \cdot e^{-\frac{mg}{kT}x} \quad \text{Barometerformel}$$

Bei  $T = 273.15 \text{ K}$  erhält man mit  $m_{\text{Luft}} = 4.82 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$  den Druck auf Meereshöhe:

$p(0) = n_0 kT = 1016 \text{ hPa} = 1 \text{ atm}$  (Normdruck);

bei gleicher Temperatur in 1000 m Höhe wird:  $p(1000) = 880 \text{ hPa}$  ( $m_{\text{Luft}}g/kT = 1.25 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$ ).

Sie haben gesehen: Physikalische Überlegungen haben auf die Differentialgleichung (A1.1) geführt. Deren Lösung  $n(x)$  ist ganz einfach. Die Amplitude  $A$  wird durch eine Bedingung am Rand bei  $x = 0$  ebenfalls aufgrund einer physikalischen Betrachtung festgelegt. Das ist im folgenden unsere Methode!

## 2.3 Die Schrödingergleichung bestimmt die Zustandsfunktion

Im Unterricht haben Sie gelernt, dass mit den Quantenobjekten eine Funktion  $\psi$  auftritt. Ihr Quadrat  $\psi^2$  gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte  $P$  dafür an, ein Teilchen in einem kleinen Volumenelement  $dV$  anzutreffen:

$$dP = \psi^2 dV \quad \Leftrightarrow \quad \psi^2 = \frac{dP}{dV}$$

Das  $\psi^2$  kann in Experimenten gemessen werden: Beim Doppelspaltexperiment etwa ergibt sich die typische Intensitätsverteilung wie beim Experiment mit Lichtwellen. Doch wieso besitzt die Grösse  $\psi$  Welleneigenschaften? Was bedeutet dieses  $\psi$ ? Wodurch wird es bestimmt? Und wie kann dieses  $\psi$  berechnet werden? - Wir wollen zuerst die Terminologie erläutern und anschliessend diesen Fragen in fünf Schritten nachgehen.

In verschiedenen Büchern werden Sie verschiedene Bezeichnungen für das finden, was wir hier "*Zustandsfunktion*" nennen. Mancherorts spricht man von "Zustandsvektoren" und macht damit klar, dass diese mathematischen Objekte wie Vektoren zusammengefügt werden können. Oft liest man auch den Terminus "Wellenfunktion". Dies ist oft sinnvoll. Effektiv können Zustandsfunktionen wie Wasserwellen interferieren. Und zudem hat die Zustandsfunktion freier Quantenobjekte die mathematische Form einer Welle. Aber Elektronen etwa, die den "Leim" einer chemischen Bindung ausmachen, sind in einem Zustand, der mit der üblichen Vorstellung einer Welle wenig gemeinsam hat. Da ist die Benennung " $\psi$ -Funktion" neutraler. Doch gibt sie möglicherweise zu psychedelischen  $\psi$ -Assoziationen Anlass ...

*1. Schritt:* An die Stelle der Ortsfunktion  $s(t)$ , aus der man  $v(t)$  und andere Grössen klassischer Teilchen berechnen kann, tritt in der Quantenmechanik die Zustandsfunktion  $\psi$ . Sie wissen schon, dass in der Quantenphysik nur noch Wahrscheinlichkeitsangaben möglich sind. Mit der Grösse  $\psi(x)$ , deren Wert sich von Ort zu Ort ändert, können nun alle Grössen, die den Zustand eines Quantenobjekts charakterisieren, ausgerechnet werden:

- Die *Wahrscheinlichkeitsdichte*, ein Teilchen im infinitesimal kleinen Volumenelement  $dV$  an der Stelle  $x$  zu finden, ist also  $dP(x) = \psi(x)^2 dV$ . Die Orbitale, die Sie aus dem Chemieunterricht kennen, sind Bilder dieser Wahrscheinlichkeitsdichte.
- Die Zustandsfunktion  $\psi(x)$  ermöglicht, die *Energie* eines Quantenobjekts zu berechnen. Wie das vor sich geht, lernen Sie im nächsten Abschnitt.
- Mit  $\psi(x)$  kann man auch den Impuls und weitere Grössen ausrechnen. Doch die dafür nötigen Prozeduren werden Sie erst an der Hochschule kennenlernen. Das  $\psi(x)$  ist so ausgelegt, dass die Unschärferelation immer erfüllt bleibt.

Wie man die Funktion  $\psi(x)$  berechnet und wie sie aussieht, möchten Sie wohl gerne wissen.

*2. Schritt:* In 2.2. haben Sie gelernt, was Sie brauchen, um ganze Funktionen berechnen zu können: Differentialgleichungen. Sind die *Differentialgleichung* und die Randbedingungen *für die Zustandsfunktion* gegeben, ist alles berechenbar! Doch woher kommt die entsprechende Differentialgleichung? Am Beispiel der Barometerformel haben Sie gesehen, wie physikalische Überlegungen auf die Differentialgleichung des Atmosphärendrucks führten. Dies versuchen wir hier ebenso: Gesucht sind alle physikalischen Einflüsse auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens. Wir beginnen mit einem einfachen Spezialfall und analysieren ihn vorerst mit den Begriffen der klassischen Physik:



3. *Schritt*: Denken Sie an ein *Elektron*, das sich auf einer Bahn mit grossem Abstand  $x$  auf ein Proton zubewegt. Zwischen den beiden punktförmig angenommenen Teilchen wirkt die *Coulombkraft*  $F = (1/4\pi\epsilon_0) \cdot qQ/x^2$ . Die dazugehörige potentielle Energie  $E_{pot}$  ist  $E_{pot} = -(1/4\pi\epsilon_0) \cdot qQ/x$ . Die potentielle Energie  $V$  hängt nur vom Abstand  $x$  der beiden Teilchen ab:  $E_{pot} = V(x)$ . Nun besitzt das Elektron aber auch eine kinetische Energie  $E_{kin} = mv^2/2 = p^2/2m$ . Mit der totalen Energie  $E = E_{kin} + E_{pot}$  berechnet sich  $E_{kin}$  demnach als  $E_{kin} = p^2/2m = E - V(x)$ . Umgeformt heisst es dann:  $p^2 = 2m[E - V(x)]$ .

Nun wechseln Sie von der klassischen zur Quantenphysik und ändern Ihre Betrachtungsweise! Fassen Sie mit de Broglie das Elektron als eine Welle mit Impuls  $p = h/\lambda$  auf. Es gilt dann auch:  $p/h = 1/\lambda$ . Quadriert man und setzt dann den klassischen Impulswert von oben ein, ergibt sich die folgende "halbklassische" Beziehung:

$$p^2 = 2m[E - V(x)] = \frac{h^2}{\lambda^2} \Rightarrow \frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m}{h^2} [E - V(x)] \quad (2.2)$$

Die "Bahn" des Elektrons, hier noch ausgedrückt durch die Grössen  $x$  und  $\lambda$ , wird wesentlich bestimmt durch die totale Energie  $E$  und durch das Potential  $V(x)$ , in dessen "Kraftfeld" es sich bewegt. Wir gehen davon aus, dass  $V(x)$  sich im Verlaufe der Zeit nicht ändert.

4. *Schritt*: Im dritten Schritt wurde leider die klassische Voraussetzung gemacht, das Elektron befinde sich genau am Bahnort  $x$  mit dem exakten Impuls  $p = h/\lambda$ . Diese Annahme ist, wie Sie wissen, unhaltbar. Die Unbestimmtheit von Ort und Impuls eines Quantenobjektes wird durch die Heisenbergsche *Unschärferelation* quantitativ beschrieben. Um diesem Wesenszug der Natur gerecht zu werden, ist es notwendig, vom klassischen Ortsbegriff Abschied zu nehmen und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in die Gleichung (A1.2) einzubauen. Wir benötigen die Zustandsfunktion  $\psi(x)$ . Doch wie soll die Verknüpfung geschehen? Am besten wohl über die de Broglie-Wellenlänge  $\lambda$ ! Bei einem freien Teilchen muss sie in der Zustandsfunktion stecken, beispielsweise in der Form:  $\psi(x) = \cos(2\pi x/\lambda)$ . Eine verhältnismässig einfache Beziehung zwischen  $\lambda$  und  $\psi(x)$  erhalten Sie, wenn Sie  $\psi(x)$  zweimal nach  $x$  ableiten:

$$d^2/dx^2 \psi(x) = -(2\pi/\lambda)^2 \cos(2\pi x/\lambda) = -(2\pi/\lambda)^2 \psi(x)$$

Die Grösse  $\lambda^2$  kann also umgerechnet werden in  $\psi(x)''$ . Dies ist wichtig, wenn wir nun daran gehen, die Gleichung (2.2) nach dem Vorschlag von Erwin Schrödinger so zu verändern, dass die Zustandsfunktion  $\psi(x)$  in ihr auftaucht.



Erwin Schrödinger: Er war 1926 Professor an der Universität Zürich

5. Schritt: Die quantenmechanische Version der Gleichung (2.2) hat Erwin Schrödinger 1926 *entwickelt*. Man würde ihm unrecht tun, schriebe man "erraten". Und doch war damals viel Intuition dabei. Schrödinger ergänzte die klassische Mechanik durch seine Differentialgleichung in einer Weise, die der Ergänzung der Strahlenoptik zur Wellenoptik entspricht. In vielen Fällen kommt die Strahlenoptik zu den gleichen Ergebnissen wie die Wellenoptik. Wenn aber das Licht durch sehr kleine Öffnungen und feine Strukturen strömt, dann kann nur die Wellenoptik die Beobachtungen korrekt beschreiben. Ebenso genügt die klassische Mechanik beispielsweise bei der Berechnung der Bewegung der Elektronen durch eine TV-Röhre. Wenn jedoch diese Elektronen mit den Atomen in der Fluoreszenzschicht wechselwirken, dann braucht es die Quantenmechanik.

Es gibt keinen Beweis für die Richtigkeit der Schrödingergleichung - ebensowenig wie für die klassische Bewegungsgleichung ( $F = ma$ )! In vielen Experimenten *bestätigt* sie die Natur. Schrödingers Gleichung ist die gesuchte Differentialgleichung für die Zustandsfunktion  $\psi(x)$ . Alle physikalischen Bedingungen, welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und andere Wesenszüge eines Teilchens beeinflussen, gehen in die Schrödingergleichung ein.

Die folgenden Rechnungen wollen den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik andeuten. Schrödinger postuliert folgende *Ersetzungen* in der Gleichung (2.2):

$$\frac{1}{\lambda^2} \xrightarrow{QM} -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$$

und

$$[E - V(x)] \xrightarrow{QM} [E - V(x)]\psi(x)$$

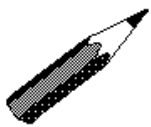
Damit erhalten Sie die sogenannte *zeitunabhängige Schrödingergleichung* für ein Teilchen, das sich im Potential  $V(x)$  befindet:

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [V(x) - E] \psi(x)} \quad (2.3)$$

Zu dieser fundamentalen Entdeckung des 20. Jahrhunderts einige Bemerkungen:

- Wir geben zu, dass wir *die Variable t* absichtlich aus der ganzen Problematik heraushalten. Natürlich hängt eine Welle von den Variablen  $x$  und  $t$  ab; sie ist allgemein eine Funktion  $f(kx - \omega t)$ . Stellen Sie sich hier einfach eine Momentaufnahme vor: Dann ist  $t$  fix und fällt weg! Wollten wir  $t$  auch in die Zustandsfunktion hineinbringen, dann wären komplexe Zahlen nötig. Diese zusätzliche Problematik ersparen wir uns. Damit verlieren wir allerdings die Möglichkeit, Prozesse zu betrachten, bei denen sich beispielsweise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ändert. Wir müssen uns mit Anfangs- und Endsituation eines solchen Prozesses zufrieden geben.
- Wir beschränken uns einstweilen auf die Schrödingergleichung für ein *einzelnes* Quantenobjekt. Schon das einfachste Molekül, das  $H_2$ , stellt uns dann vor neue Probleme.
- Auch die Schrödingergleichung ist nicht der Weisheit letzter Schluss. Die Natur ist vielfältiger. Unter anderem müssten auch die Wesenszüge der *Relativitätstheorie* hier einfließen. Dabei würde der Spin auftauchen.

Vielleicht möchten Sie sich ein genaueres Bild von der Entstehung der Quantenmechanik machen. Vorschlag: Kuhn W.: Physik Band II, Oberstufe, 2. Teil Klasse 12/13. Braunschweig 1990. (Westermann). Die Seiten 428 bis 432 sind der Wellenmechanik gewidmet, die vorwiegend auf de Broglie und Schrödinger zurückgeht. Aber eine ganze Reihe weiterer Physiker: Bohr, Born, Heisenberg, Pauli usw. haben in den "goldenen Zwanzigerjahren" andere, hier nicht erwähnte Beiträge zur neuen Grundlage der Physik geliefert.

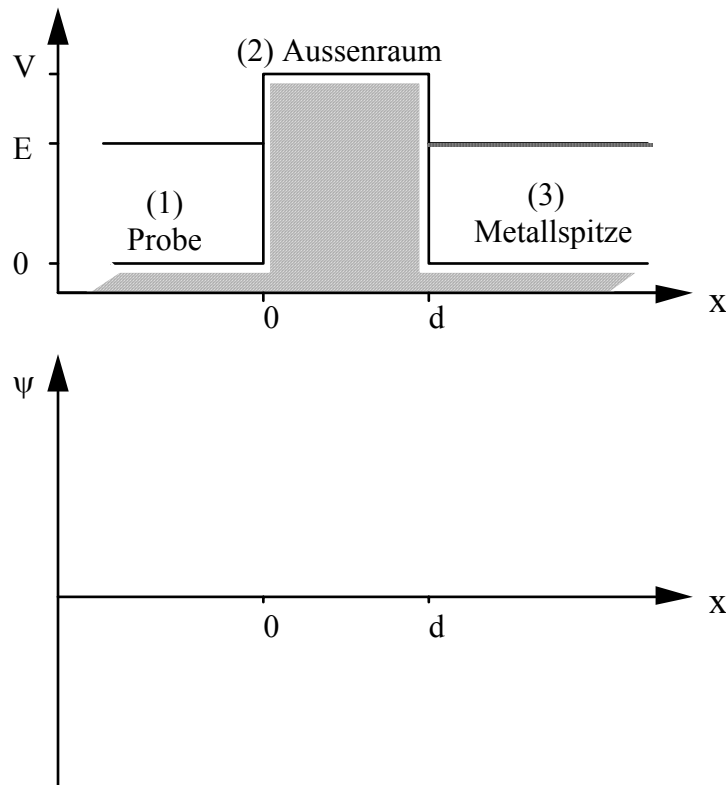


### Aufgabe 2.3: Bild der Zustandsfunktion

- Machen Sie sich anhand einer kleinen Skizze vertraut mit der Schreibweise  $\cos(kx) = \cos(2\pi x/\lambda)$  und der Wellenzahl  $k = 2\pi/\lambda$ !
- Lassen Sie sich die quantenmechanische Ersetzung nochmals durch den Kopf gehen und rechnen Sie die einzelnen Schritte nach, bis Sie die Schrödingergleichung erhalten!
- Berechnen Sie die Zustandsfunktion  $\psi$  eines freien Teilchens, dh. lösen Sie (2.3) für  $V(x) = 0$ !

### Der Tunneleffekt

Wir illustrieren die Schrödingergleichung zuerst an einem Ihnen vertrauten Beispiel: am Tunneleffekt! Sie wissen, dass der Tunnelstrom mit zunehmendem Abstand zwischen der Probenoberfläche und der Wolframspitze exponentiell abnimmt. Die folgende Figur zeigt die Situation:



Figur 2.2: Potential und Zustandsfunktion bei einer Barriere

Die Energie  $E$  des Elektrons ist kleiner als die Barrierenhöhe  $V$ . Das Potential  $V(x)$  selber sei im Aussenraum, dh. zwischen 0 und  $d$ , konstant  $V(x) = V$ .

Die Schrödingergleichung ist nun für die folgenden drei Bereiche zu lösen:

(1) in der Probe  $x < 0$ , (2) im Aussenraum  $0 < x < d$ , (3) im Bereich der Metallspitze  $d < x$ .

(1) Innerhalb der Probe wirken keine Kräfte: das Potential ist also Null. Die Lösung ist somit diejenige eines freien Teilchens:  $\psi_i(x) = A_i \cos(kx + \delta)$  mit  $k^2 = 2mE/(\hbar/2\pi)^2$ .

(2) Die Schrödingergleichung im Aussenraum lautet:

$$\psi''(x) = 2m/(\hbar/2\pi)^2 \cdot [V-E] \psi(x)$$

Oder mit der Abkürzung  $\kappa^2 = 2m/(\hbar/2\pi)^2 \cdot [V-E]$  einfach

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x).$$

Ihre Lösung kennen Sie aus Aufgabe A1.1 Nr.5:

$$\psi_a(x) = A_a e^{\kappa x} + B_a e^{-\kappa x}.$$



#### Aufgabe 2.4: Zur Eindeutigkeit der Lösung

Überlegen Sie sich, warum beim Tunneleffekt  $A_a = 0$  und  $B_a \neq 0$  sein muss! Stellen Sie sich vor, die Metallspitze sei noch weit entfernt.

(3) In der Metallspitze ist das Potential ebenfalls = 0. Die Lösung der Schrödingergleichung ist wiederum die des freien Teilchens. Es hat dieselbe Energie wie in der Probe, dh. die Wellenlänge  $\lambda$  und die Wellenzahl  $k$  der Zustandsfunktion bleiben gleich.

Insgesamt erhalten wir:

(1) Probe:  $\psi_i(x) = A_i \cos(kx + \delta)$

(2) Aussenraum:  $\psi_a(x) = B_a e^{-\kappa x}$

(3) Metallspitze:  $\psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$

Sicher finden Sie nun selbst heraus, wie die Zustandsfunktion aussieht (Aufgabe 2.5):



### Aufgabe 2.5: Die Zustandsfunktion zeichnen

- Zeichnen Sie den Verlauf der Zustandsfunktion in der Figur A1.2 im vorgesehenen Diagramm ein.  
Die Aufgaben b) und c) sind *fakultativ*.
- Berechnen Sie für  $A_i = 3$  die Phasenverschiebung  $\delta$  und die Amplitude  $B_a$  für die Zustandsfunktion im Aussenraum! Überlegen Sie sich dabei, dass  $\psi_i(0) = \psi_a(0)$  und die ersten Ableitungen bei  $x = 0$  ebenfalls identisch sind (kein Knick in der Zustandsfunktion). Die Lösung soll nur  $V$  und  $E$  enthalten. In einem zweiten Schritt bestimmen Sie die Zustandsfunktion in der Metallspitze:  $\psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$ . Dies gelingt Ihnen mit derselben Idee wie vorhin, indem Sie die Randbedingungen bei  $x = d$  aufschreiben. Die Lösungen enthalten neben  $V$  und  $E$  noch  $k$ ,  $\kappa$  und  $d$ .
- Schreiben Sie ein kleines Programm, welches für den Bereich  $-5.5 \leq x \leq 7.0$  die gesamte Zustandsfunktion des tunnelnden Elektrons zeichnet. Sie sollen in das Programm  $V$ ,  $E$  und  $d$  eingeben können (z.B.  $V = 4$ ,  $E = 3$ ,  $d = 1.5$ ). Setzen Sie dabei  $2m/(\hbar/2\pi)^2 = 1$ ; die Masseneinheiten sind für den qualitativen Verlauf der Funktion nicht weiter interessant.



### Wir fassen zusammen:

Wir verstehen den idealisierten Tunneleffekt quantitativ:

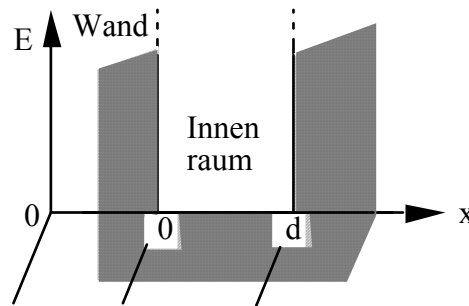
- In der Probe sind die Elektronen praktisch frei. Ihre Zustandsfunktion ist wellenförmig. Die Wellenlänge hängt von der Bewegungsenergie ab.
- Im Aussenraum nimmt die Amplitude von  $\psi$  exponentiell ab. Damit sinkt auch die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zu finden.
- In der Metallspitze sind die Elektronen wieder praktisch frei. Die Zustandsfunktion ist  $\psi$  wieder wellenförmig. Die Amplitude ist kleiner und die Phasenlage ist anders, aber die Wellenlänge ist gleich wie in der Probe.

Soweit so gut. Wenn man aber vorhersagen will, wie gross der Tunnelstrom ist, wieviele Elektronen sich verschieben, dann muss man die Elektronendichte in der Probenoberfläche kennen. Die Elektronen dort sind jedoch nicht frei, sondern an ihre Atomkerne gebunden. Wir müssen demnach die Schrödingergleichung für gebundene Quantenobjekte untersuchen.

## 2.4 Die Quantisierung der Energie

Beim Spektrallinienexperiment haben Sie gesehen, dass die vom Gas abgestrahlten Photonen nur bestimmte Energien besitzen. Die sogenannte *Quantisierung* der Energie ist typisch für *gebundene* Quantenobjekte. In solchen Fällen treten zur Schrödingergleichung Randbedingungen hinzu, die die Menge der Lösungen drastisch reduzieren.

Am übersichtlichsten ist die Situation bei folgendem Extremfall: das Quantenobjekt ist in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden eingesperrt.



Figur 2.3: Unendlich hoher Potentialtopf

Wie ist es in den Potentialwänden? Sie sehen: Mit  $V(x) = \infty$  erlaubt die Gleichung 2.3 für die Zustandsfunktion dort nur die Lösung  $\psi(x) = 0$ . Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Wand ist also null. Als Folge davon gelten für die Zustandsfunktion die folgenden Randbedingungen:  $\psi(0) = \psi(d) = 0$ . Mathematisch ist vieles ähnlich wie beim Tunneleffekt:



### Aufgabe 2.6: Potentialtopf selber bearbeiten

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für ein Quantenobjekt mit der Energie  $E$  im Innenraum des Potentialtopfs auf!
- Lösen Sie die Schrödingergleichung unter der Berücksichtigung der Bedingung  $\psi(0) = 0$ ! (Die Amplitude  $A$  bleibt unbestimmt.)
- Die zweite Randbedingung lautet  $\psi(d) = 0$ . Was bedeutet das für  $k$ , respektive für die Wellenlänge? Geben Sie die Abhängigkeit von der Potentialtopfbreite  $d$  an!
- Was für eine Konsequenz haben die Randbedingungen somit für die Energie?

Was haben Sie in Aufgabe 2.6. gelernt? Die Lösungen der Schrödingergleichung im Innenraum des unendlich hohen Potentialtopfs sind Zustandsfunktionen mit ganz bestimmten Wellenlängen, weil die Randbedingungen das fordern. Solche Zustandsfunktionen werden oft als *Eigenfunktionen* bezeichnet. Die dazugehörigen Energien sind quantisiert und proportional zu  $n^2$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Dieses  $n$  nennt man *Energie-Quantenzahl*.

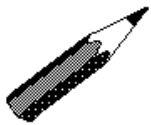
$$E_n = \frac{h^2}{8md^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Ein mechanisches Analogon zum Potentialtopf ist die beidseitig eingespannte Saite. Die Schwingungen der Saite sind stehende Wellen. Zu jeder Wellenlänge  $\lambda$  gehört wegen  $f = c/\lambda$  eine bestimmte Tonhöhe. So eine Saite kann nur in eigener Weise schwingen:  $n = 1$  gibt den Grundton,  $n = 2$  den ersten Oberton, die Oktave zum Grundton usw. Die Energie-Quantenzahlen  $n$  bedeuten anschaulich auch "Anzahl der Schwingungsknoten plus 1".

Angenommen, die Zustandsfunktion  $\psi(x)$  beschreibe ein derart eingesperrtes Elektron. Dieses Elektron kann also nur bestimmte Energien besitzen. Es hat jedoch die Möglichkeit, von selbst von einem höheren Energieniveau  $n$  in ein tieferes zu springen und dabei Energie abzugeben. (Wie wahrscheinlich dieser Prozess ist, muss hier offen bleiben. Das ist ein Problem für die Hochschule.) Die beim Sprung frei werdende Energie wird als Photon abgestrahlt. Es besitzt bestimmte Energie, Frequenz und Wellenlänge:

$$E_{\text{photon}} = E_r - E_s = \frac{h^2}{8md^2} (r^2 - s^2) = hf_{rs} = hc / \lambda_{rs}$$

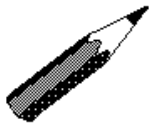
Die Absorption von Strahlung durch ein System mit gebundenen Zuständen verläuft in jeder Hinsicht umgekehrt.



### Aufgabe 2.7: Energieniveaux-Schema

Zeichnen Sie die Energieniveaux des unendlichen Potentialtopfs für  $n = 1$  bis  $n = 6$  auf einer senkrechten Achse ein, und tragen Sie alle Elektronensprünge auf  $n = 2$  ein!

Natürlich ist Ihr Einwand richtig, es handle sich hier um ein ausgefallenes Potential. In der Natur sei ja alles endlich. Die folgende Aufgabe zeigt Ihnen jedoch, dass Sie damit doch schon realistische Fragestellungen bearbeiten können:



### Aufgabe 2.8: Farbzentren

Alkalihalogenidkristalle (NaCl, KBr, CsJ usw.) besitzen eine kubische Symmetrie. Sie enthalten verschiedenartige Störstellen, unter anderem fehlende Halogenid-Ionen. Durch Erwärmen kann man die Anzahl dieser würfelförmigen *Kastenpotentiale* erhöhen. Ein auf etwa 650 °C erhitzter KCl-Kristall kann dann dadurch violett verfärbt werden, dass man ihm von einer Stromquelle Elektronen zuführt. Diese füllen nämlich die Potentialtöpfe und absorbieren Licht einer bestimmten Wellenlänge: gelb beim KCl. Der Kristall erscheint in der Komplementärfarbe violett.

Farbzentren sind natürlich endliche, dreidimensionale Potentialtöpfe. Weil das Geschehen in den drei Dimensionen als unabhängig betrachtet werden darf, können Sie doch schon qualitativ richtige Vorhersagen liefern:

Überlegen Sie sich anhand des eindimensionalen Potentialtopfs, wie die Energieniveaux der Elektronen von der Kastengrösse abhängen könnten. Schliessen Sie sodann auf die Energie der Quanten, welche die Übergänge zwischen den Niveaux freisetzen. Und sagen Sie zum Schluss voraus, welche Farbe NaCl annehmen müsste, wenn bekannt ist, dass die Kästen im NaCl kleiner sind als im KCl.

Wir könnten jetzt den Potentialtopf mit endlichen Wänden studieren. Er ist grundsätzlich das Gegenstück zur Potentialstufe, die wir beim Tunneleffekt angetroffen haben. Ausser zusätzlicher Mathematik würden wir wenig Neues lernen.

Als zweites Beispiel untersuchen wir deshalb den harmonischen Oszillator, ein System, das man in ganz verschiedenen physikalischen Situationen antrifft. Indem wir das Problem in der Manier der Quantenmechaniker anpacken, erreichen wir den Gipfel der mathematischen Komplexität dieses Leitprogramms. Dieses Beispiel ist fakultativ; in den Kapiteln über Atombau und die chemische Bindung benützen wir jedoch die hier erarbeiteten Ergebnisse.

### Der harmonische Oszillator (fakultativ)

Ein konkretes Beispiel für einen harmonischen Oszillator ist das Federpendel. Es ist das einfachste gebundene System der klassischen Mechanik. Bei jedem Oszillator zwingt eine rücktreibende Kraft  $F$  die schwingende Masse  $m$  immer wieder zur Gleichgewichtslage  $x = 0$  zurück. Wenn eine Hooke'sche Feder oder eine andere Ursache dabei *das lineare Kraftgesetz*  $F(x) = -kx$  erfüllt, dann haben wir einen *harmonischen* Oszillator. Die Bewegungsgleichung liefert für ihn die Differentialgleichung  $mx'' = -kx$ . Diese hat die Struktur der Nr. 6 von Aufgabe 2.1. Die Lösung, das Weg-Zeit-Gesetz, ist eine Sinus- respektive eine Cosinusfunktion. Für die Schwingungsdauer  $T$  und die entsprechende Kreisfrequenz  $\omega$  gilt:

$$2\pi / T = \omega = \sqrt{k / m}$$

Verwechseln Sie in diesem Abschnitt die Richtgrösse (= Federkonstante)  $k$  nicht mit der Wellenzahl  $k_*$ , die bei freien Teilchen eine Rolle spielt!

Die im Federpendel steckende Gesamtenergie, wird laufend zwischen der Bewegungsenergie  $mv^2/2$  und der Federenergie  $kx^2/2$  hin- und hergeschoben. Die Federenergie, allgemein die potentielle Energie des Oszillators, liefert direkt das Potential  $V(x) = kx^2/2$ , das für jedes lineare Kraftgesetz gilt.

Zur quantenmechanischen Analyse des harmonischen Oszillators setzen wir die Potentialfunktion  $V(x) = kx^2/2$  in die Schrödingergleichung A1.3 ein und erhalten:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(h/2\pi)^2} \left[ \frac{1}{2} kx^2 - E \right] \psi(x)$$

Diesen Typus von Differentialgleichung finden Sie nicht unter den einfachen Fällen von A 1.1. Schwierigkeiten verursachen das  $x^2$  und die additive Konstante  $-E$ . Doch leuchtet ein, dass die Zustandsfunktion für den Grundzustand so sein muss, dass die Masse  $m$  am wahrscheinlichsten bei  $x = 0$  anzutreffen ist. Der Lösungsansatz geht also von einer Wahrscheinlichkeitsfunktion aus:

$$\psi(x) = Ae^{-ax^2}$$

Unsere, respektive Ihre Aufgabe besteht aus verschiedenen Teilen:

- Überprüfen, ob die Funktion die Differentialgleichung erfüllt. Wenn "ja" ...
- den Wert von  $a$  durch die Grössen  $m$ ,  $k$  und  $h/2\pi$  ausdrücken,
- die Energie  $E$  des Grundzustands bestimmen und
- Überlegungen zum Wert von  $A$  anstellen.
- Ist dies alles erfolgreich bewältigt, dann müssen Sie sich auf die Suche nach weiteren Zustandsfunktionen machen.





### Aufgabe 2.9: Quantenmechanischer Oszillator (fakultativ)

- Setzen Sie die vorgeschlagene Funktion in die Schrödingergleichung ein und zeigen Sie, dass es eine Lösungsfunktion ist.
- Suchen Sie nach Bedingungen, mit denen Sie  $a$  und  $E$  ausrechnen können.

Wenn Sie 2.9 a) durchrechnen, stossen Sie auf eine Gleichung, die Sie beidseits durch  $\psi$  teilen können. Damit ist a) erledigt. Sie erhalten dann folgende Gleichung:

$$-2a + 4a^2 x^2 = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2} + \frac{m k}{(\hbar/2\pi)^2} x^2$$

Sie kann nur für alle  $x$  gelten, wenn die Glieder mit den Konstanten unter sich gleich sind *und* wenn die Glieder mit den  $x^2$  gleich sind. Damit erhalten wir zwei Gleichungen für  $a$  und  $E$ :

$$-2a = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2} \quad \text{und} \quad 4a^2 x^2 = \frac{m k}{(\hbar/2\pi)^2} x^2$$

Mit ein wenig Geduld und Konzentration und der Abkürzung  $\omega = \sqrt{k/m}$  finden Sie:

$$a = \frac{m\omega}{2(\hbar/2\pi)} \quad \text{und} \quad E = \frac{1}{2}(\hbar/2\pi)\omega$$

Zur Amplitude  $A$  haben wir bisher keine Information erhalten. Weil der harmonische "Potentialtopf" keine bestimmte Ausdehnung hat, gibt es keine Randbedingungen. Die Grösse  $A$  muss in einem konkreten Fall so festgelegt werden, dass die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte über den ganzen Raum aufsummiert die vorhandene Anzahl Quantenobjekte - meist 1 - liefert.

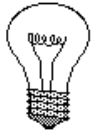
Wir haben damit den Grundzustand des harmonischen Oszillators vollständig erfasst. *Dass* es sich um den *Grundzustand* handelt, davon können Sie sich selber überzeugen, wenn Sie das gleiche Prozedere mit den beiden Funktionen  $\psi_2$  und  $\psi_3$  durchführen:

$$\text{angeregte Zustände} \quad \psi_2(x) = Bxe^{-bx^2} \quad \text{und} \quad \psi_3(x) = C(1-k)x^2 e^{-cx^2}$$

Als Nebenprodukte erhalten Sie alle Energien:

$$E_1 = \frac{1}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \text{und} \quad E_2 = \frac{3}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \text{und} \quad E_3 = \frac{5}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \dots \quad E_n = (n - \frac{1}{2})(\hbar/2\pi)\omega$$

Auch hier führt die Schrödingergleichung eines gebundenen Systems auf die Energiequantisierung und die Energiequantenzahl  $n$ . Interessanterweise haben hier alle *Energienstufen* den gleichen Wert  $\Delta E = E_r - E_s = (\hbar/2\pi)\omega = hf \Rightarrow$  die Quanten von Einstein und Planck!

**Wir fassen zusammen:**

Sie haben anhand von zwei Beispielen gesehen, dass ein Quantenobjekt, welches in einem Potential (d.h. Kräftefeld) gebunden ist, nur ganz *bestimmte Energien* aufweisen kann. Die Quantisierung der Energie ergibt sich als Folge der Tatsache, dass nur eine begrenzte Anzahl von Funktionen, die Eigenfunktionen, sowohl die Schrödingergleichung als auch die Randbedingungen des Problems erfüllen.

Eine wichtige Charakterisierung der Zustandsfunktion eines Quantenobjekts in einem Potentialtopf ist die *Energie-Quantenzahl*  $n$ .

Sie haben auch eine Erklärung für das *Linienpektrum* gefunden: Weil die gebundenen Elektronen nur diskrete Energien besitzen, wird beim Quantensprung von einem höheren auf ein tieferes Niveau immer eine bestimmte Energie frei: die Energiedifferenz der beiden Niveaux. Diese Energiedifferenz trägt das Photon davon. Emittede und absorbierte Photonen besitzen also nur gewisse Wellenlängen  $\lambda = hc/\Delta E$ , was im Spektrometer sofort sichtbar ist.

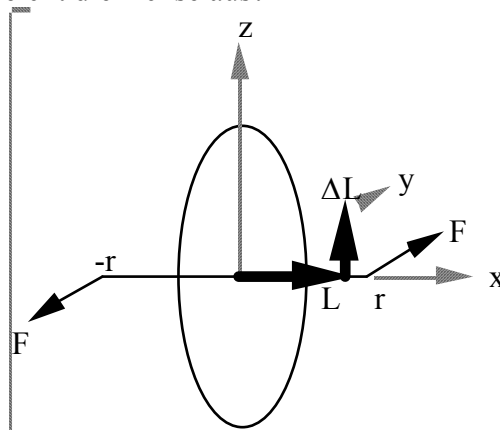
## 2.5 Die Rolle des Drehimpulses

Jetzt ist es an der Zeit, eine der ältesten Erfindungen der Menschheit - das Rad - quantenmechanisch in drei Dimensionen zu untersuchen.



### Experiment 2.3: Zum Drehimpuls

Wiederholen Sie das folgende klassische Experiment: Halten Sie ein Velorad an den Achsenenden mit beiden Händen fest. Die Achse liegt dabei horizontal. Versetzen Sie das Rad in Rotation. Versuchen Sie nun, die Achse in horizontaler Richtung zu drehen, indem Sie mit der rechten Hand drücken, mit der linken ziehen. - In welche Richtung weicht die Achse aus?



Figur 2.5: Drehmoment und Drehimpuls

Sollten Sie keine Ahnung von den Begriffen "Drehmoment  $M$ " und "Drehimpuls  $L$ " (mehr) haben, können Sie beispielsweise im Metzler-Physik nachschlagen (Grehn J.: Physik. Stuttgart 1988 (Metzler). 66-75). Wie Sie (wieder) wissen, ändert bei diesem Experiment der Drehimpuls  $L$  zwar nicht seinen Betrag, doch seine Richtung gemäss dem wirkenden Drehmoment:  $\Delta L_z = \Delta t M$ . Das Drehmoment ist  $M = r \times F$ . Dabei wird die Achse mit der Kraft  $F$  um ein kleines Stückchen  $\Delta y$  gedreht. Die verrichtete Arbeit beträgt  $F \Delta y = \Delta E$ . Wenn wir voraussetzen, dass  $\Delta y$  kleiner als der Umfang ist, also  $\Delta y \leq 2\pi r$ , so können wir folgende Ungleichung aufstellen:

$$\Delta L_z = M \Delta t = r F \Delta t = \frac{r}{\Delta y} \Delta y F \Delta t = \frac{r}{\Delta y} \Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2\pi} \Delta E \Delta t$$

Das Rad soll jetzt schrumpfen! Es werde so klein, dass die Unschärferelation wichtig wird! Erinnern Sie sich an die Unschärferelation für die Energie  $\Delta E \Delta t \geq h$ ? Mit ihr wird:

$$\Delta L_z \geq \frac{1}{2\pi} \Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}$$

Die kleinstmögliche Änderung des Drehimpulses in eine Raumrichtung (hier die z-Richtung) ist also  $\Delta L_z = h/2\pi$ . Der Drehimpuls  $L$  ändert sich also nur sprunghaft. Der Grund dafür liegt in der Tatsache, dass die Wechselwirkung  $\Delta E \Delta t$  zwischen dem Quantenobjekt und der die Kraft ausübenden Umwelt nicht kleiner als das Wirkungsquantum  $h$  werden kann.

Ist es möglich, diese neue Form der Unschärferelation aus der Schrödingergleichung herzuleiten? - Im Prinzip ja, aber für uns wird der mathematische Aufwand zu zeitraubend.

Eine Drehbewegung benötigt zumindest zwei Dimensionen. Wir müssten also zuerst formal die Schrödingergleichung auf *zwei Dimensionen* ausbauen. Interessant würde es dann beim Aufstellen der Randbedingungen.

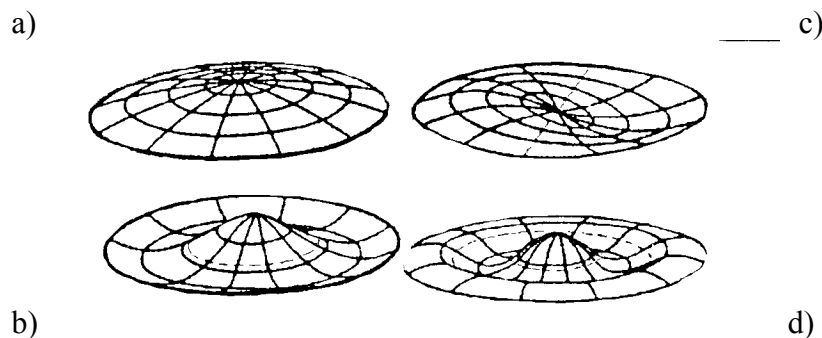
Wenn die physikalische Situation rotationssymmetrisch ist, müssen die Zustandsfunktionen nach einer Umdrehung wieder den Anfangswert erreichen. Der Astronom, Physiker und Mathematiker Friedrich Wilhelm Bessel hat solche Funktionen schon anfangs des letzten Jahrhunderts entdeckt. Wie sie aussehen können, zeigt das



#### Experiment 2.4: Zu 2-dimensionalen Schwingungen

Füllen Sie eine 2-Liter Mineralwasserflasche aus Plastik dreiviertel voll mit Wasser und regen Sie mit einem kleinen Schlag Oberflächenwellen an.

Gleichartige stehende Wellen können Sie auch auf einer Kesselpauke oder einem simplen Eisenblech beobachten, wenn Sie nach dem Vorschlag von Chladni feinen Sand darauf streuen. Aus der unendlich grossen Zahl von Zustandsfunktionen, welche die geforderten Randbedingungen erfüllen, sind in Figur 2.6 vier einfache Fälle ausgewählt:



Figur 2.6: 2-dimensionale Eigenschwingungen

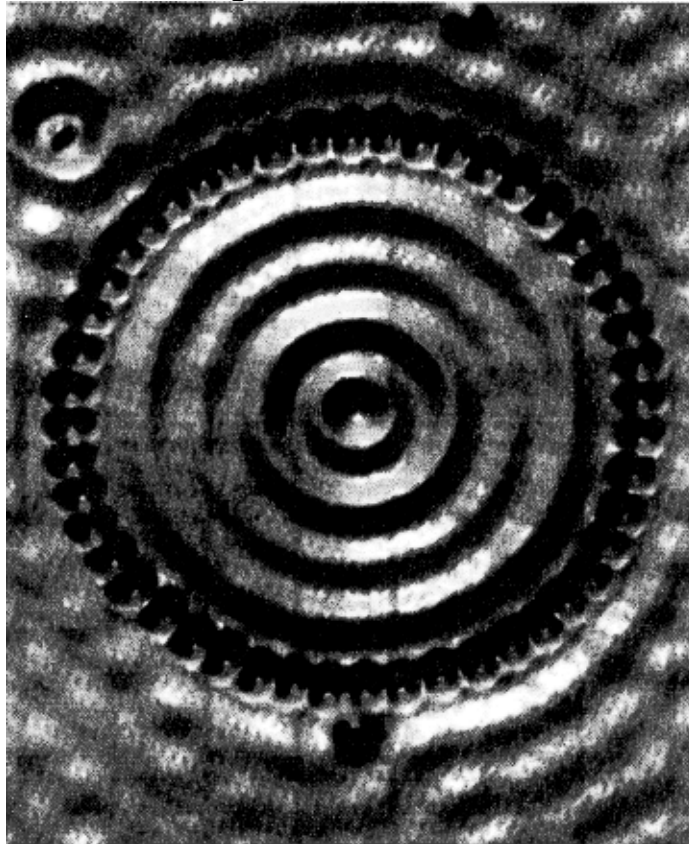
Sie sehen, dass die Figuren a), b) und d) vollständige Rotationssymmetrie besitzen. Das bedeutet, anschaulich offensichtlich, aber wir können es hier nicht beweisen: Der Drehimpuls ist null. Die drei Zustandsfunktionen unterscheiden sich jedoch in der Anzahl der kreisförmigen Knotenlinien! Haben Sie eine Idee, wie dies zu interpretieren ist?

Richtig! Sie haben beim eindimensionalen, endlichen Potentialtopf gelernt, dass die Energie mit zunehmender Knotenzahl wächst. Benennen wir folglich auch hier die Zahl der radialen, kreisförmigen Knoten einer Welle mit  $n_r$  und zählen dabei die Knotenlinie am Rand mit. Figur a) stellt offensichtlich den Grundzustand  $n = n_r = 1$  dar; in den Figuren b) und d) sind die Zustände mit den Energieniveaus  $n = 2$  und  $n = 3$  gezeichnet.

Vergleichen wir nun die Figuren b) und c). Beide besitzen je eine innere Knotenlinie und eine am Rand. Deshalb dürfen wir annehmen, dass sie durch die gleiche Zahl  $n = 2$  charakterisiert werden. Die Asymmetrie von c) kommt durch den zusätzlichen Drehimpuls  $L$  zustande. Er hat den minimalen Wert  $L = \hbar/2\pi$ . Die Anzahl Drehimpulsportionen, die eine Zustandsfunktion mit sich bringt, wird durch eine zweite Quantenzahl  $l$  gekennzeichnet. Sie heisst *Drehimpuls-Quantenzahl*  $l$ . a)  $n = 1$  und  $l = 0$ , b)  $n = 2$  und  $l = 0$ , c)  $n = 2$  und  $l = 1$  usw.

*Übrigens:* Mit dem Drehimpuls wächst auch die Gesamtenergie eines Systems, denn es kommt noch die Rotationsenergie hinzu. Sie lautet klassisch:  $E = L^2/(2mr^2)$ . Man muss sie beim Formulieren der Schrödingergleichung auch berücksichtigen. Das gibt zusätzlichen Rechen-

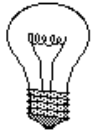
aufwand. Doch die in Figur 2.6 sichtbare Symmetrie der Zustandsfunktion bleibt. Und am wichtigsten ist der Nachweis, dass es solche zweidimensionalen Zustandsfunktionen in der Natur wirklich gibt. Sie finden ihn in Figur 2.7:



Figur 2.7: RTM-Aufnahme eines "Quantenpferchs"

Mit Hilfe des RTM gelang es einer Forschergruppe 1993, auf einer extrem sauberen Kupferoberfläche 48 Eisenatome zu einem Ring anzuordnen. Dieser Ring stellt für die Oberflächen-Elektronen des Kupfers einen kreisförmigen Potentialtopf dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen in Innern sieht offensichtlich so aus, wie wir vorhergesagt haben. Ihre Struktur stimmt mit derjenigen einer stehenden Welle auf einer Membran überein.

Der Drehimpuls der Elektronen im Quantenpferch ist null. Woher sollten sie auch den Kick bekommen? Sie wissen aber aus der Elektrodynamik, dass Elektronen, die senkrecht in ein Magnetfeld geschossen werden, zu kreisen anfangen, weil sie der Lorentzkraft unterworfen sind. Dieser Effekt wird nicht nur in der TV-Röhre und im CERN ausgenützt. Auch in den HALL-Sonden zur Magnetfeldmessung spielt er eine Rolle. Lesen Sie kurz im Metzler-Physik nach, wenn Ihnen dieses Stichwort nichts (mehr) sagt: (Grehn 92, 228-230). Zwingt man die Elektronen in eine eindimensionale Schicht (Metall-Oxid-Silizium-Struktur), dann sind wiederum die Voraussetzungen unserer Theorie erfüllt. Die kreisenden Elektronen dürfen dann aber nur die erwähnten Drehimpuls-Portionen besitzen. So entsteht der *Quanten-Hall-Effekt*, den Klaus von Klitzing 1980 entdeckt hat. Er erlaubt heute die direkte Verknüpfung der "antiken" Masseinheit "Ohm" mit den Naturkonstanten  $e$  und  $h$ !

**Wir fassen zusammen:**

Die Randbedingungen bei Rotationssymmetrie führen mit der Schrödingergleichung auf die Quantisierung des Drehimpulses. Jede Zustandsfunktion gebundener Quantenobjekte besitzt deshalb auch einen bestimmten Drehimpuls. Im Minimum ist er 0.

## 2.6 Elektronen im Festkörper

Im Chemieunterricht haben sie schon das Schalenmodell für den Aufbau der Atome kennengelernt. Die Elektronen besitzen verschiedene Energien, die einer sogenannten Schale zugeordnet werden. Wie diese Schalen zustandekommen, werden wir in Additum 2 besprechen. Das chemische Verhalten der Atome wird durch die Elektronen in der äussersten von Elektronen besetzten Schale bestimmt. Dadurch erhält man das Periodensystem mit in den Gruppen angeordneten Atomen mit ähnlichen Eigenschaften.

Ein Festkörper ist eine räumlich feste, periodische Anordnung von Atomen. Die elektrischen Eigenschaften des Festkörpers werden wiederum durch die Elektronen in der äussersten besetzten Schale der Atome bestimmt.

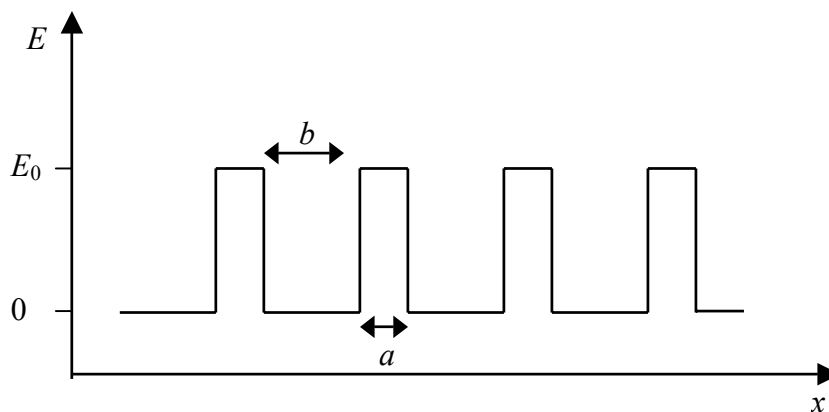


### Aufgabe 2.10: Periodensystem und Leitfähigkeit

Kann man die Leitfähigkeit der Festkörper einer Gruppe bzw. mehreren Gruppen im Periodensystem zuordnen?

Im folgenden stellen wir ein Modell vor, mit dem sich die Unterschiede von elektrisch leitenden, halbleitenden und isolierenden Festkörpern, wie Kupfer, Silizium und Diamant erklären lassen. Dazu verwenden wir die Schrödingergleichung. Das Modell vereinfacht den dreidimensionalen Festkörper zu einer Dimension. Trotzdem erklärt es die wesentlichen Eigenschaften der Elektronen in einem Festkörper.

In Abschnitt 2.4 führte der Potentialtopf zu diskreten Energie Niveaus. Im Kronig-Penney Modell wird der Festkörper durch eine Aneinanderreihung von Potentialtöpfen beschrieben (Figur 2.8).



Figur 2.8: Das Potential im eindimensionalen Festkörper

Die Elektronen können sich in diesem Potential bewegen. Um dieses Modell zu berechnen, braucht man komplexe Zahlen. Damit wir hier keine Zeit mit Mathematik verlieren, wird der für die Quantenmechanik typische Lösungsweg nur skizziert.

Um die Schrödingergleichung zu lösen unterteilen wir die x-Achse in Gebiete mit  $E = E_0$  und mit  $E = 0$ .

Die Lösung für den Fall  $E = 0$  kennen wir schon vom Tunneleffekt:

$$\psi_i(x) = A \cos(kx + \delta)$$

mit

$$k^2 = 2mE/(\hbar/2\pi)^2$$

Die Energie der im Festkörper gebundenen Elektronen ist kleiner als  $E_0$ .

Die  $\psi$ -Funktion für die Gebiete mit  $E = E_0$  ist uns aber auch schon aus dem Tunnelproblem bekannt:

$$\psi_a(x) = B e^{\kappa x} + C e^{-\kappa x}$$

mit

$$\kappa^2 = 2m(E_0 - E)/(h/2\pi)^2$$

Nun müssen wir die Randbedingungen bei den Potentialsprüngen betrachten. Zusätzlich muss die  $\psi$ -Funktion periodisch in  $x$  sein. Um die Rechnung zu vereinfachen greifen wir zu einem mathematischen Trick. Wir lassen  $a$  gegen 0 gehen und  $E_0$  gegen unendlich. Gleichzeitig bleibt das Produkt aus  $a$  und  $E_0$  konstant. Dies bedeutet, dass wir unendlich hohe unendlich dünne Potentialwände betrachten.

Die Rechnungen sind lässlich und kompliziert ohne zum Verständnis beizutragen. Man erhält ein Gleichungssystem für  $A$ ,  $B$ ,  $C$  und  $\delta$ . Dies lässt sich lösen, wenn folgende Gleichung erfüllt ist:

$$\cos(\omega a) = \frac{P}{ka} \sin(ka) + \cos(ka) = S(ka)$$

mit

$$P = \frac{m(a+b)}{(h/2\pi)^2} a E_0$$

und

$$\omega > 0.$$

Die linke Seite der oberen Gleichung nimmt Werte zwischen  $-1$  und  $1$  an. Wenn der Betrag der rechten Seite grösser als  $1$  ist, kann die Schrödingergleichung nicht gelöst werden.

Man muss aber gar nicht die  $\psi$ -Funktion berechnen. Die Gleichung für  $S$  erlaubt schon Aussagen über die erlaubten Elektronenenergien des Modell-Festkörpers. Dies ist ein typischer Fall im Bereich der Quantenmechanik. Ohne die genaue  $\psi$ -Funktion zu kennen kann man schon Aussagen über Eigenschaften des untersuchten Objektes machen.

In Figur 2.9 wird die rechte Seite der Gleichung als Funktion von  $ka$  und somit als Funktion der Energie für  $P = 6$  dargestellt.  $P$  ist ein Parameter des Modells, den man an Messdaten anpassen muss.

Deutlich erkennt man die sogenannten Verbotenen Zonen in den Bereichen von  $ka=4$  und  $ka=7$ . Im Festkörper kann es keine Elektronen geben, die die entsprechende Energie besitzen. Dazwischen sind die sogenannten Bänder erlaubter Energien. Es gibt nicht mehr nur diskrete Werte von Energien, die ein Elektron besitzen kann sondern ein kontinuierliches Band.

In der Realität ist natürlich alles ein wenig komplizierter. Wenn man die Bänder in drei Dimensionen mit realistischen Potentialen für die einzelnen Atome berechnen will, so muss man das Problem mit leistungsfähigen Computern numerisch berechnen. Als Beispiel zeigt Figur 2.10 die Bandstruktur des bekanntesten Halbleiters, Silizium. Im dreidimensionalen Raum entstehen nicht nur Kurven, sondern Energie-Ebenen. Die Figur zeigt zwei aneinandergelegte Schnitte durch solche Ebenen. Dargestellt ist die Energie erlaubter Zustände entlang zweier verschiedener Richtungen im Festkörper. Deshalb ist das Bild unsymmetrisch. Die Erklärung der speziellen Art der Darstellung von Impuls  $p$  gegen Energie müssen wir der Hochschule überlassen. Die durchgezogenen Linien entsprechen den Bändern. Hier kann man ablesen welche Energien im Silizium erlaubt sind. Man erkennt mehrere Bänder erlaubter Energien, die sich auch teilweise überschneiden. Deutlich sieht man eine Bandlücke, d.h. einen Energiebereich, wo kein Band an keinem Ort im Silizium hineinragt. Das unterste mit Elektronen voll besetzte Band nennt man Valenzband, das nächst höhere Band Leitungsband. Die elektrische Leitfähigkeit wird durch die Elektronen im Leitungsband hervorgerufen.



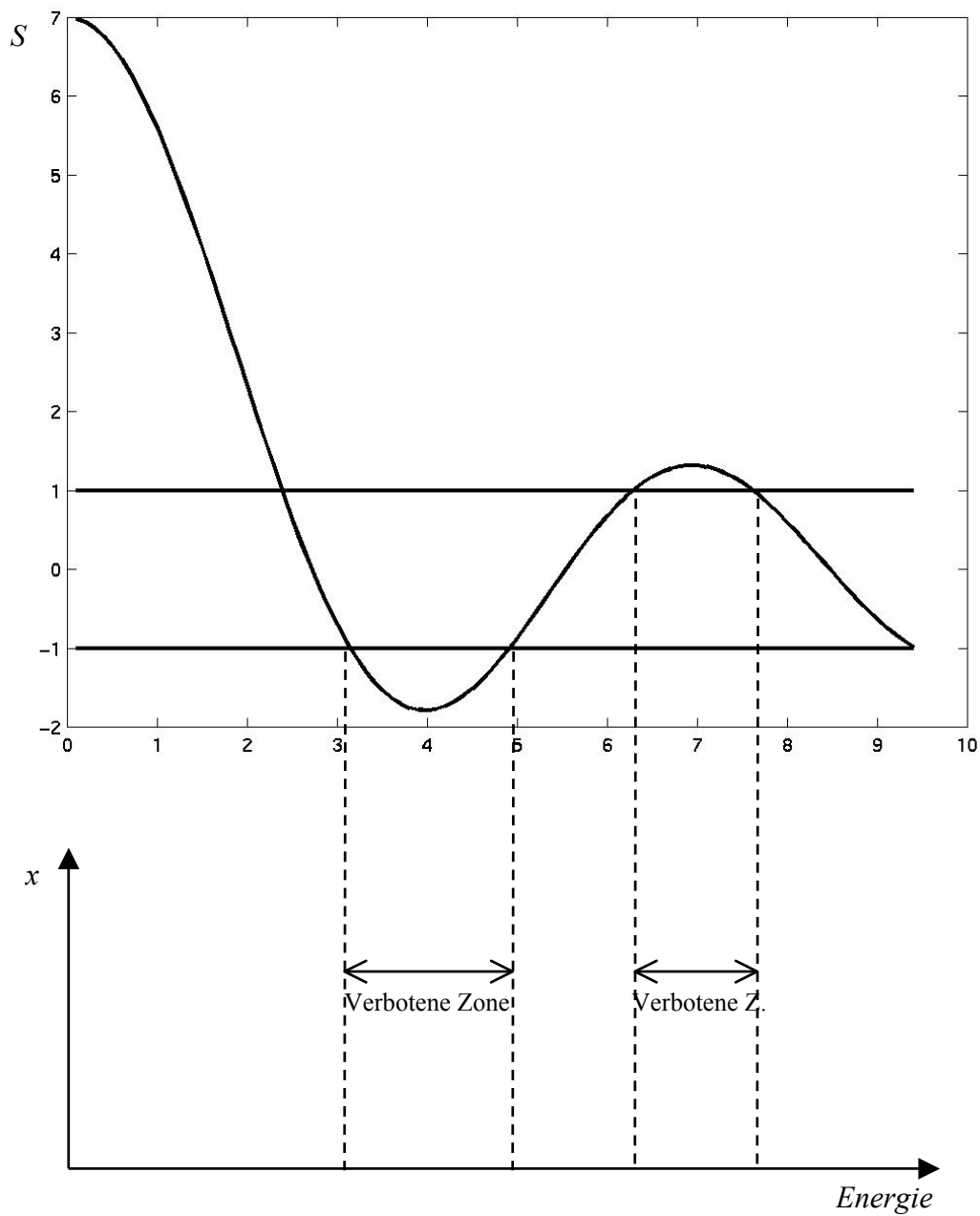


Fig 2.9: Die Lösung des Kronig-Penney Modell

Wir erkennen aber auch, wie gut das Kronig-Penney Modell schon trotz unrealistischer Vereinfachungen die wesentlichen Merkmale darstellt.

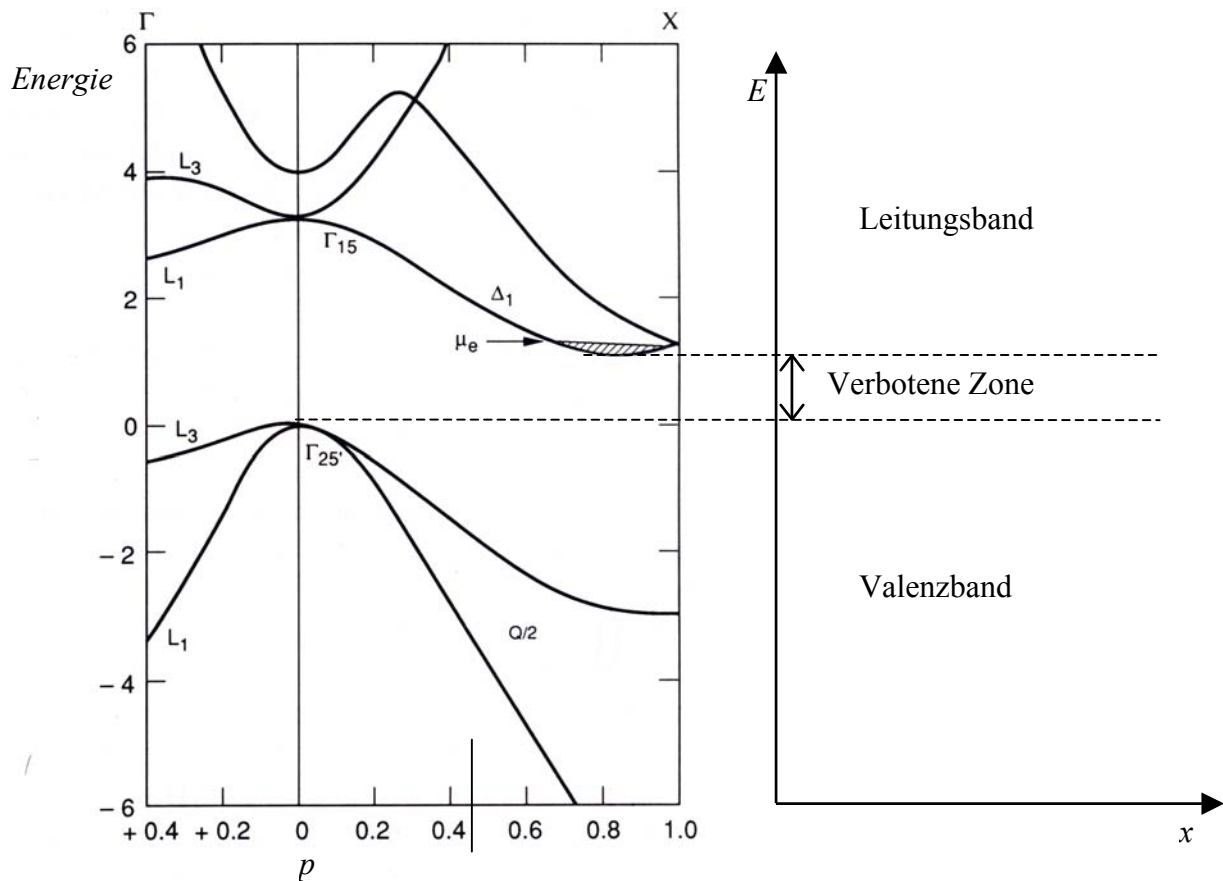


Fig.2.10 Die Bandstruktur von Silizium

(Quelle: Basic Properties of semiconductors Vol.1, ed.: T.S. Moss)

**Aufgabe 2.11: Energiebänder aus Energieniveaus**

Besuchen Sie im Internet die Homepage:

<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/eband.html>

Hier finden Sie einen Energiebandberechner.

- Benutzen Sie die Standardeinstellungen für die Tiefe, Breite und den Abstand der Potentialtöpfe. Berechnen Sie die Energien für 1, 2, 5 und 10 Töpfe. Was beobachten Sie? Bestehen die Energiebänder wirklich aus Bändern?
- Welchen Einfluss hat die Tiefe der Potentialtöpfe? Wo entsteht das „Band“ bei tiefen Potentialtöpfen. Welche Bedeutung hat das im Festkörper?

Wie kann man nun mit diesem Modell den Unterschied zwischen Leiter, Halbleiter und Isolator erklären?

Dazu kommt es nicht nur auf die Bänder an, sondern auch auf die Verteilung der Elektronen in den Bändern. Wenn ein Band komplett mit Elektronen gefüllt ist, so können diese Elektronen sich in dem Band nicht bewegen, weil keine freien Plätze zur Verfügung stehen. Dies nennt man dann einen Isolator. Ist ein Band nur teilweise gefüllt so können sich die Elektronen in diesem Band bewegen und ein elektrischer Strom kann fließen. Es entsteht ein Leiter. Bei einem Halbleiter ist eigentlich auch ein Isolator. Das oberste Band ist vollständig mit Elektronen gefüllt. Allerdings ist das nächst höhere Band so dicht bei diesem gefüllten Band, dass die Wärmeenergie der Elektronen bei Zimmertemperatur ausreicht, um die

Elektronen in das höhere Band zu befördern. Aber auch Lichtenergie kann benutzt werden, um ein Elektron in das höhere Band zu befördern. Diesen Effekt nutzt man bei Solarzellen aus. Figur 2.10 fasst den unterschied der Bandstruktur zusammen.

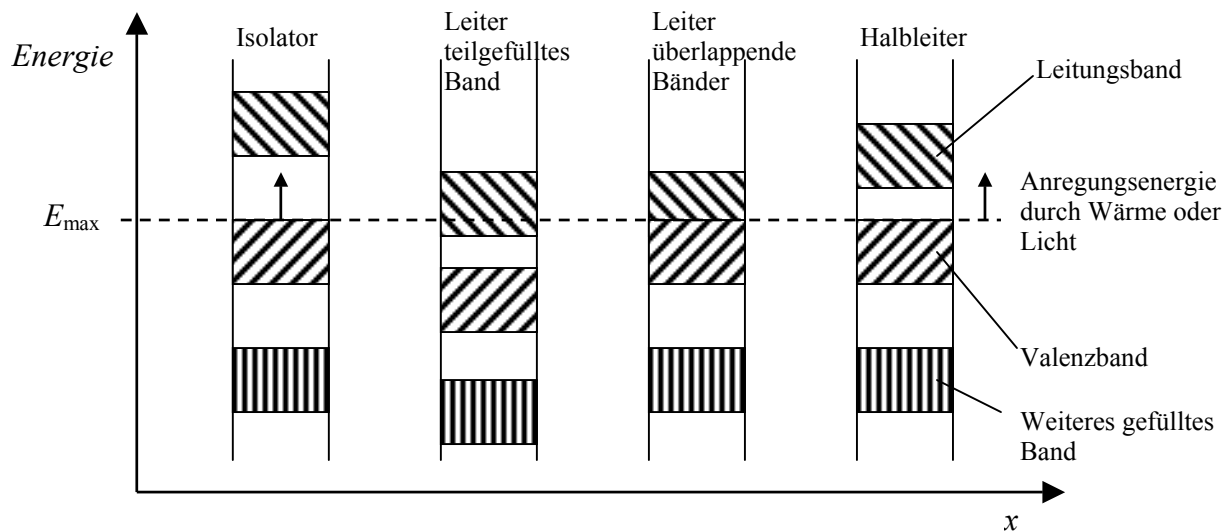
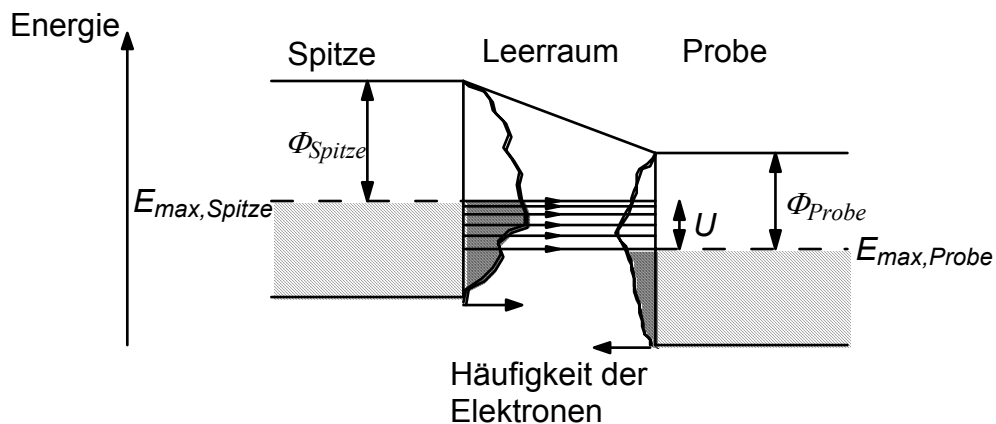
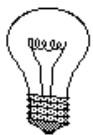


Fig 2.10 Bändermodell für Isolator, Leiter und Halbleiter.  $E_{\max}$  ist die Energie bis zu der Elektronen im Festkörper existieren.

Jetzt verstehen wir die Figur 1.4 aus Kapitel 1 besser. Dargestellt ist das Leitungsband der Spitze und Probe.  $E_{\max}$  ist die Energie, bis zu der die Leitungsbander gefüllt sind. Die Elektronen tunneln nur in einen nicht besetzten Zustand des Leitungsbandes der Probe.



Figur 1.4: Der Tunnelstrom hängt von der Häufigkeitsverteilung der Elektronen im Metall ab



### Wir fassen zusammen:

Die Schrödingergleichung bestimmt die Energieverteilung der Elektronen in einem Festkörper. Es gibt Energien, die kein Elektron im Festkörper besitzen kann. Diese Energiebereiche nennt man verbotene Zone. Je nach Vorhandensein oder Grösse der verbotenen Zone, ist der Festkörper ein Leiter, Halbleiter oder Isolator.

## Lösungen zu den Aufgaben

### Aufgabe 2.1: Lösungsansätze für Differentialgleichungen

Nr.1.  $f(x) = Ae^{(2x)}$

Nr.4.  $f(x) = Ax^3$

Nr.2.  $f(x) = Ae^{(x^2)}$

Nr.5.  $f(x) = Ae^{(3x)}$  und  $f(x) = Be^{(-3x)}$

Nr.3.  $f(x) = Ae^{(-x^2/2)}$

Nr.6.  $f(x) = A\sin x$  und  $f(x) = B\cos x$

### Aufgabe 2.2: Berücksichtigen der Randbedingungen

a)  $A = 1$  und  $B = 9$ ;  $f(x) = e^{3x} + 9e^{-3x}$

b)  $C = \sqrt{A^2 + B^2}$ ;  $\tan \delta = -A/B$

### Aufgabe 2.3: Bild der Zustandsfunktion

a) Cosinus-Kurve mit  $x$ -Achse in der Abszisse und der Wellenzahl  $k$ .b) Lesen Sie wenn nötig im Text nach. Beachten Sie, dass hier für das Potential gilt:  $V(x) = 0$ .

c)  $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [-E] \psi(x)$  Vgl. Aufg. A 1.1 Nr. 6

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad \text{Mit der Abkürzung } k = \sqrt{\frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [E]}$$

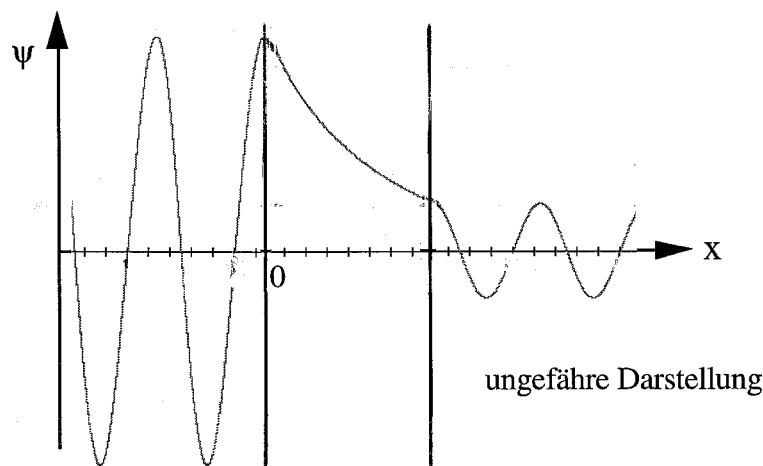
$$\Rightarrow \psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad A \text{ und } B \text{ sind unbestimmt.}$$

### Aufgabe 2.4: Zur Eindeutigkeit der Lösung

Für grosse  $x$  überwiegt die erste Teillösung, d.h.  $\psi(x) = Ae^{kx}$ . Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\psi^2$  wächst exponentiell an und würde in der Metallspitze riesig. Praktisch alle Elektronen müssten sich dort befinden.

### Aufgabe 2.5: Zustandsfunktion zeichnen

a)



ungefähre Darstellung

Fig 2.11: Zustandsfunktion für eine Potentialbarriere

b) Die drei Zustandsfunktionen im Innern der Probe, im Aussenraum und in der Metall-spitze:

$$\psi_i(x) = 3 \cos(kx + \delta) \quad \psi_a(x) = B_a e^{-\kappa x} \quad \psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$$

Beachten Sie, dass die beiden cos-Funktionen *nicht* in Phase sind.

Die physikalischen Randbedingungen führen nun zu folgenden mathematischen Forderungen:

- An der Stelle  $x = 0$  ergibt sich ein Gleichungssystem für die Amplitude  $B_a$  und für  $\delta$ :

$$\left. \begin{aligned} 3 \cos(\delta) &= B_a \\ -3k \sin(\delta) &= -\kappa B_a \end{aligned} \right\} \Rightarrow \delta = \arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right) = \arctan\left(\sqrt{\frac{V-E}{E}}\right)$$

$$B_a = 3 \frac{k}{\sqrt{\kappa^2 + k^2}} = 3 \sqrt{\frac{E}{V}} < 3$$

- An der Stelle  $x = d$  ergibt können Sie ebenso  $A_M$  und  $\delta_M$  bestimmen:

$$\left. \begin{aligned} 3 \sqrt{\frac{E}{V}} e^{-\kappa d} &= A_M \cos(kd + \delta_M) \\ -3 \kappa \sqrt{\frac{E}{V}} e^{-\kappa d} &= -k A_M \sin(kd + \delta_M) \end{aligned} \right\} \Rightarrow A_M = 3 e^{-\kappa d}$$

$$\delta_M = \arctan\left(\sqrt{\frac{V-E}{E}}\right) - kd$$

c) Das Programm besitzt die folgende Struktur:

1. Input V, E und d	2. FROM $x_{\min}$ TO 0
(Parameterbesetzung)	$y = 3 \cos(kx + \delta)$
$k = \sqrt{E}$	Point (x,y)
$\kappa = \sqrt{V - E}$	FROM 0 TO d
$\delta = \arctan(\kappa/k)$	$y = B_a e^{-\kappa d}$
$\delta_M = \arctan(\kappa/k) - kd$	Point (x,y)
$A_M = 3 e^{-\kappa d}$	FROM d TO $x_{\max}$
$B_a = 3 \sqrt{E/V}$	$y = A_M \cos(kx + \delta_M)$
	Point (x,y)

### Aufgabe 2.6: Potentialtopf selber bearbeiten

a) Vergleichen Sie mit A1.3 c). Die Schrödingergleichung lautet auch hier:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [-E] \psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad k = \sqrt{\frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [E]}$$

b) Die allgemeine Lösung lautet analog zu A1.1 Nr. 6

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{mit} \quad \psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

Somit:  $\psi(x) = A \sin(kx)$ . Für die Wellenzahl  $k$  gilt der Wert aus A1.6 a).

c) Die Bedingung am rechten Rand liefert  $A \sin(kd) = 0$ . Nicht mehr jedes  $k$  und jedes  $\lambda$  ist möglich. Das Produkt  $kd$  muss ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$  sein:

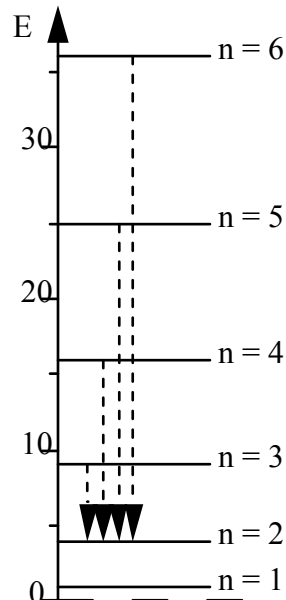
$$kd = n\pi \quad \Rightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda} d = n\pi \quad \Rightarrow \quad \lambda_n = \frac{2d}{n} \quad \text{bzw.} \quad d = \frac{\lambda_n}{2} n$$

Zwischen 0 und  $d$  befindet sich ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge.

d) Aus obiger Gleichung folgt sofort eine Bedingung für die quantisierte Energie:

$$kd = n\pi \Rightarrow k^2 d^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} E d^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{8md^2} n^2$$

### Aufgabe 2.7: Energieniveaux-Schema



### Aufgabe 2.8: Farbzentren

Wenn im Kristall kein sichtbares Licht absorbiert wird, ist er durchsichtig. Absorbieren die Farbzentren vorwiegend im orange-gelben Bereich des Spektrums, dann erscheint der Kristall in der Komplementärfarbe violett. Das ist beim KCl der Fall.

Beim NaCl sind die Gitterabstände  $d$  kleiner als beim KCl, denn das Na-Atom hat weniger Elektronen und ist deshalb kleiner. Der Raum, der dem Elektron im Farbzentrum zur Verfügung steht, ist nun kleiner: ein engerer Potentialtopf. Nach unserer quantenmechanischen Rechnung steigt die Energie des eingeschlossenen Elektrons mit  $1/d^2$ . Die für die Absorption wesentlichen Energiedifferenzen steigen im gleichen Ausmass. Die Absorption beim NaCl wird also bei kürzeren Wellenlängen stattfinden, im blau-violetten Bereich. Die Komplementärfarbe entspricht dem beobachteten *Gelbton* des NaCl.

### Aufgabe 2.9: Harmonischer Oszillator (quantenmechanisch)

a)  $\psi(x) = Ae^{-ax^2} \Rightarrow \psi'(x) = -2axAe^{-ax^2} \Rightarrow \psi''(x) = -2aAe^{-ax^2} + 4a^2x^2Ae^{-ax^2}$

Alles eingesetzt liefert:

$$-2a\psi + 4a^2x^2\psi = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2}\psi + \frac{mk}{(\hbar/2\pi)^2}x^2\psi$$

Sie können diese Gleichung durch die Funktion  $\psi(x)$  teilen.  $\psi(x)$  ist also eine Lösung, wenn die zusätzlichen Bedingungen für  $a$  und  $E$  erfüllt sind.

- b) Teilen Sie die letzte Gleichung durch die Funktion  $\psi$ ! Die weiteren Schritte sind im Text nach der Aufgabenstellung 2.9 angegeben.

### Aufgabe 2.10: Energiebänder aus Energieniveaus

- a) Bei einem Topf gibt es 2 Niveaus. Bei 2 Atomen erkennt man noch 2 dicht beieinander liegende obere Niveaus und 2 sich fast überlappende unter Niveaus (Lupe). Bei 5/10 Töpfen gibt es 2 „dicke“ Niveaus. Mit Hilfe der Vergrößerung erkennt man, dass diese jeweils aus 5/10 Niveaus zusammen gesetzt sind.
- b) Bei sehr tiefen Potentialtöpfen entsteht das Energieband nur in den höheren Energien. Im Festkörper heisst das, dass die Elektronen mit den tiefen Energien in den Potentialtöpfen gebunden sind und nicht zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen können. Je tiefer die Energieniveaus in den Töpfen liegen, desto kleiner ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Elektronen in die benachbarten Töpfe tunneln können. Der Wert der  $\psi$ -Funktion fällt zwischen den Töpfen sehr schnell auf null. Eigentlich dürfte das Energieniveaus in den unteren Niveaus nicht durchgängig gezeichnet sein!