

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.4

Aufgabe 26

a.)

Die stationäre Schrödingergleichung für einen Hamiltonoperator $\hat{H}(x, y, z)$ in drei Dimensionen lautet

$$\hat{H}(x, y, z)\psi(x, y, z) = W\psi(x, y, z), \quad (1)$$

mit dem Energieeigenwert W und der Wellenfunktion $\psi(x)$. Damit gilt für den zweidimensionalen harmonischen Oszillator:

$$\left\{ \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{m}{2} (\omega_x^2 \hat{x}^2 + \omega_y^2 \hat{y}^2) \right\} \psi(x, y) = W\psi(x, y), \quad (2)$$

und weiterhin mit

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (3)$$

ergibt sich:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2) \right\} \psi(x, y) = W\psi(x, y). \quad (4)$$

b.)

Im Prinzip handelt es sich bei obiger Schrödingergleichung um eine partielle Differentialgleichung in zwei Dimensionen. Solche sind im Allgemeinen schwierig zu lösen. Da in dieser jedoch die Variablen x und y voneinander entkoppelt sind (also keine Produkte von x und y oder von Ableitungen $\partial/\partial x$ und $\partial/\partial y$ auftreten), funktioniert ein Produktansatz (Separationsansatz) der Form $\psi(x, y) = f(x)g(y)$:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} g(y) + f(x) \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2) f(x)g(y) \right\} = Wf(x)g(y). \quad (5)$$

Ziehen wir das Produkt $f(x)g(y)$ aus der Klammer auf der linken Seite heraus, ergibt sich:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2) \right\} f(x)g(y) = Wf(x)g(y). \quad (6)$$

Durch Vergleich beider Seiten ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2) = W, \quad (7)$$

bzw., wenn wir das Ganze nach x und y sortieren:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_x x^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} + \frac{m}{2} \omega_y y^2 \right) = W. \quad (8)$$

Auf der rechten Seite der Gleichung steht die Konstante W (die weder von x noch von y abhängt). Der Ausdruck in der ersten Klammer ist eine Funktion von x und der Ausdruck der zweiten Klammer eine Funktion von y . Wenn auf der rechten Seite eine Konstante steht, muss sich die x - und y -Abhängigkeit beider Klammern gegenseitig herausheben, was jedoch nicht möglich ist, weil jede Klammer für sich jeweils nur von einer Variablen abhängt. Somit können die Klammerausdrücke selbst nur wieder Konstanten sein; wir bezeichnen diese als W_x und W_y . Es gilt dann die Nebenbedingung $W_x + W_y = W$ und wir haben das Problem auf zwei voneinander unabhängige Gleichungen bezüglich x und y reduziert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_x x^2 = W_x, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} + \frac{m}{2} \omega_y y^2 = W_y, \quad (9)$$

bzw.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_x x^2 \right) f(x) = W_x f(x), \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2} \omega_y y^2 \right) g(y) = W_y g(y). \quad (10)$$

Wir erkennen diese beiden Differentialgleichungen! Es handelt sich damit jeweils um die Differentialgleichung eines eindimensionalen harmonischen Oszillators in x - bzw. y -Richtung.

c.)

Da wir die Lösung des eindimensionalen harmonischen Oszillators bereits kennen, können wir damit auch die Lösung des zweidimensionalen Problems aufschreiben. Die Energie ergibt sich als Summe der Energien der einzelnen harmonischen Oszillatoren:

$$W = W_x + W_y = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right), \quad (11)$$

mit den Quantenzahlen $n_x \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ und $n_y \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Wie der eindimensionale harmonische Oszillator besitzt auch der zweidimensionale eine Nullpunktsenergie, die aus $n_x = n_y = 0$ folgt:

$$W_0 = \frac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y). \quad (12)$$

Die Wellenfunktion ist ein Produkt der einzelnen Wellenfunktion, da wir die Gleichung ja mit dem Produktansatz gelöst haben:

$$\psi(x, y) = f(x)g(y) = C_{n_x} C_{n_y} H_{n_x}(b_x x) H_{n_y}(b_y y) \exp\left(-\frac{1}{2}(b_x^2 x^2 + b_y^2 y^2)\right), \quad (13a)$$

$$C_{n_x} = \frac{\sqrt{b_x}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x!}}, \quad C_{n_y} = \frac{\sqrt{b_y}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_y} n_y!}}, \quad b_x = \sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}}, \quad b_y = \sqrt{\frac{m\omega_y}{\hbar}}, \quad (13b)$$

mit den Normierungskonstanten C_{n_x} , C_{n_y} und den Hermitepolynomen H_{n_x} , H_{n_y} .

d.)

Schauen wir uns die Energieniveaus für $\omega_x = \omega_y \equiv \omega$ an:

$$W = W_x + W_y = \hbar\omega(n_x + n_y + 1). \quad (14)$$

Machen wir uns nun eine kleine Tabelle für die ersten Quantenzahlen n_x und n_y :

n_x	n_y	W	n_x	n_y	W	n_x	n_y	W	n_x	n_y	W
0	0	$\hbar\omega$	0	2	$3\hbar\omega$	1	2	$4\hbar\omega$	3	1	$5\hbar\omega$
1	0	$2\hbar\omega$	1	1	$3\hbar\omega$	2	1	$4\hbar\omega$	1	3	$5\hbar\omega$
0	1	$2\hbar\omega$	3	0	$4\hbar\omega$	4	0	$5\hbar\omega$	2	2	$5\hbar\omega$
2	0	$3\hbar\omega$	0	3	$4\hbar\omega$	0	4	$5\hbar\omega$	\vdots	\vdots	\vdots

Wir erkennen das System dahinter. Jeder Eigenwert $E_k = k\hbar\omega$ tritt genau k -mal auf. Die Eigenwerte $E_k = k\hbar\omega$ mit $k > 1$ sind nicht eindeutig einer Wellenfunktion zuzuordnen; man bezeichnet diese als entartet und zwar spricht man von k -facher Entartung. Einzig und allein die Grundzustandsenergie $E_0 = \hbar\omega$ ($k = 0$) lässt sich eindeutig der Wellenfunktion $\psi_{n_x=0}(x)\psi_{n_y=0}(y)$ zuordnen. Im Prinzip ist diese Energie einfach entartet; bei einfacher Entartung spricht man jedoch oft auch davon, dass keine Entartung vorliegt.

Anmerkung: Die Entartung von Eigenwerten ist die Folge einer Symmetrie des Hamiltonoperators. Eine Symmetrie ist eine Variablentransformation, welche den Hamiltonoperator nicht ändert. Die zugrundeliegende Symmetrie, die für $\omega_x = \omega_y = \omega$ entsteht, ist die Drehsymmetrie in der x - y -Ebene:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos \varphi + y \sin \varphi \\ -x \sin \varphi + y \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Der Hamiltonoperator

$$\hat{H}(x, y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m\omega}{2}(x^2 + y^2), \quad (16)$$

ändert sich von der Form her nicht, wenn man diesen in den neuen Variablen x' und y' ausdrückt:

$$\hat{H}(x', y') = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right) + \frac{m\omega}{2}(x'^2 + y'^2). \quad (17)$$

Für den Hamiltonoperator mit $\omega_x \neq \omega_y$ gilt dies nicht; dieser ändert sich unter solchen Drehungen. Damit wird eine Entartung der Energien für $\omega_x \neq \omega_y$ aufgehoben. Dann können alle Eigenwerte eindeutig einer Wellenfunktion zugeordnet werden.

e.)

Der Übergang von zwei nach drei Dimensionen ist nicht mehr allzu schwer; man muss nur noch einen analogen Term für die z -Koordinate hinzufügen:

$$\begin{aligned}\hat{H}(x, y, z) &= \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{m}{2}(\omega_x^2 \hat{x}^2 + \omega_y^2 \hat{y}^2 + \omega_z^2 \hat{z}^2) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2).\end{aligned}\quad (18)$$

Mittels eines analogen Separationsansatzes $\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$ lässt sich auch hier die Schrödingergleichung lösen. Dann gilt für die Gesamtenergie:

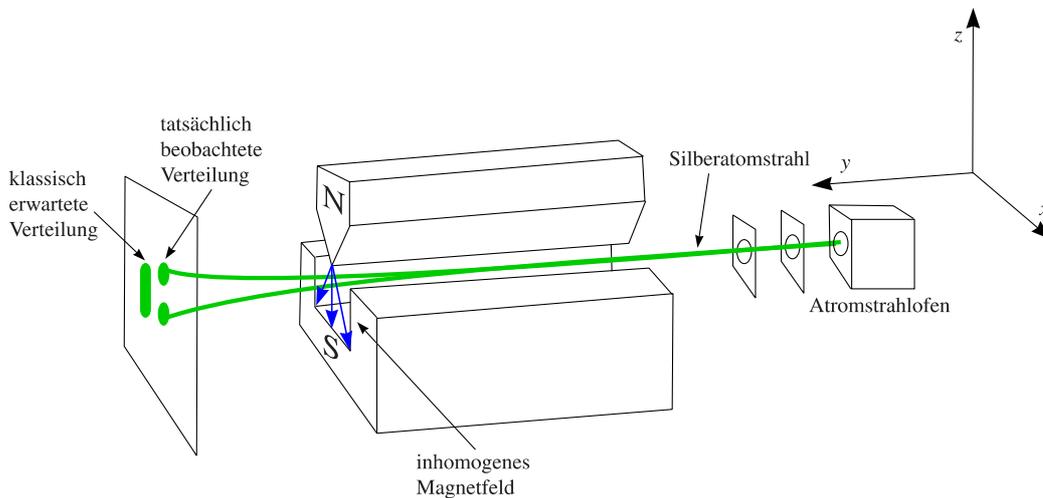
$$W = W_x + W_y + W_z = \boxed{\hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right)}.\quad (19)$$

mit den Quantenzahlen $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \cup \{0\}$.

Aufgabe 28

a.)

In einem Ofen wird Silber zum Verdampfen gebracht, so dass aus einem Loch Silberatome austreten. Diese Silberatome werden mittels zweier Lochblenden zu einem Strahl fokussiert. Der Strahl durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld und trifft auf einen Schirm; auf diesem entstehen zwei silberne Flecken.



Silberatome bestehen aus einem positiv geladenen Atomkern (mit 47 Protonen und Neutronen, deren Anzahl vom betrachteten Isotop abhängt) und einer Elektronenhülle mit 47 Elektronen. Die Elektronen sind in Aufenthaltswahrscheinlichkeitsräumen (Orbitalen) angeordnet. Diese Orbitale kennzeichnet man wiederum durch ihre charakteristischen Quantenzahlen, nämlich der Hauptquantenzahl n , der Drehimpulsquantenzahl l und der magnetischen Quantenzahl m_l . Elektronen, die sich in Orbitalen mit $l \neq 0$ befinden, besitzen einen Drehimpuls \mathbf{L} und damit ein sogenanntes magnetisches Moment:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m} \mathbf{L}, \quad \mu_z = \frac{e}{2m} L_z.\quad (20)$$

In einem inhomogenen Magnetfeld erfahren Teilchen mit einem magnetischen Moment eine Kraft. Verläuft der Teilchenstrahl genau in der y - z -Ebene, wo das Magnetfeld $\mathbf{B}_{\text{inhom}} = B \mathbf{e}_z$ besteht, so heben sich die Kräfte in x - und y -Richtung gerade auf und es gilt:

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{\text{inhom}}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z(\partial B / \partial z) \end{pmatrix}.\quad (21)$$

Schon 1922, als dieser Versuch von Stern und Gerlach zum ersten mal durchgeführt wurde, war bekannt, dass Silber ein äußerstes Elektron trägt und dass dieses die Drehimpulsquantenzahl $l = 0$ besitzt. Weiterhin wusste man, dass sich die Drehimpulse der restlichen Elektronen, die in den inneren Orbitalen sitzen, gegenseitig aufheben (Hundsche Regeln). Man würde also keine Ablenkung der Silberatome im inhomogenen Magnetfeld

erwarten, da diese kein magnetisches Moment besitzen dürften. Wie oben bereits erwähnt, stellt man jedoch nicht nur eine Ablenkung fest, sondern diese ist außerdem nicht kontinuierlich und es sind zwei einzelne diskrete Flecken erkennbar. Damit muss es sich um einen bisher unbekanntem quantenmechanischen Effekt handeln, würde man klassisch höchstens eine kontinuierliche Verteilung – also einen ganzen Silberstreifen – erwarten. Die Interpretation dafür, dass zwei abgetrennte Silberflecken entstehen, ist, dass ein Elektron zusätzlich zum bekannten Drehimpuls \mathbf{L} noch einen (bisher unbekanntem) Eigendrehimpuls besitzt. Man bezeichnet diesen Eigendrehimpuls als Spin \mathbf{S} . Der Spin ist eine rein quantenmechanische Erscheinung und besitzt kein Analogon in der klassischen Physik. Er ist nämlich eine feste Eigenschaft eines jeden Teilchens und unabänderlich. Wie dem Drehimpuls ordnet man auch dem Spin eine Quantenzahl zu, die man gewöhnlich als s bezeichnet. Um den Spin zu verstehen, müssen wir vorerst nochmals zum Drehimpuls zurück. Zur Drehimpulsquantenzahl l gibt es $2l+1$ sogenannte magnetische Quantenzahlen m_l , welche die Einstellung des Drehimpulses zur z -Achse angeben. m_l nimmt die Werte $\{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ an. Eine analoge Quantenzahl m_s führt man für den Spin ein. Für $l=0$ gilt $m_l=0$ und damit auch $\mu_z=0$. Teilchen mit $l=0$ werden in einem inhomogenen Magnetfeld also nicht abgelenkt, damit kann auch die Spinquantenzahl des Elektrons nicht $s=0$ sein. Für $l=1$ kann m_l die Werte $\{-1, 0, 1\}$ annehmen; es gibt also drei Einstellmöglichkeiten zur z -Richtung, also auch drei verschiedene Werte für μ_z . Würde ein Elektron $s=1$ besitzen, so müssten beim Stern-Gerlach-Versuch drei silberne Flecken, anstelle von zweien, sichtbar sein. Höhere Werte für s würden noch zu zusätzlichen Flecken führen. Da jedoch nur zwei Flecken sichtbar sind, muss die Spinquantenzahl halbzahlig sein:

$$s = \frac{1}{2}, \quad m_s \in \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}. \quad (22)$$

Nur dann gibt es nämlich zwei Quantenzahlen m_s und somit sind die beiden Flecken erklärbar. Hier erkennt man schon, dass der Spin etwas anderes ist als ein gewöhnlicher Drehimpuls, weil dessen Quantenzahlen halbzahlig sein können. Drehimpulsquantenzahlen l bzw. m_l sind jedoch immer ganzzahlig.

b.)

Je nach Spin unterscheidet man zwei Arten von Teilchen, nämlich solche mit halbzahligen und solche mit ganzzahligem Spin. Die ersten bezeichnet man als Fermionen und die zweiten als Bosonen. Das Pauliprinzip besagt, dass sich keine zwei Fermionen in einem Zustand aufhalten können, welcher durch den gleichen Satz von Quantenzahlen beschrieben wird. Orbitale in einem Wasserstoffatom werden beispielsweise durch die Hauptquantenzahl n , die Drehimpulsquantenzahlen l , m_l und die Spinquantenzahlen s , m_s festgelegt. Nach dem Pauliprinzip ist es nur dann möglich, dass sich zwei Elektronen (diese sind als Spin-1/2-Teilchen Fermionen) in einem Orbital mit $\{n, l, m_l\}$ aufhalten, sofern sie sich in m_s unterscheiden, also wenn das eine $m_s = 1/2$ und das andere $m_s = -1/2$ besitzt. In Systemen, die mehrere Fermionen enthalten, müssen diese aufgrund des Pauli-Prinzips auf viele unterschiedliche Niveaus verteilt werden. Das gilt nicht für Bosonen. Es können sich beliebig viele Bosonen in einem einzigen Zustand anhäufen.

c.)

Um die Tabelle zu vervollständigen, benötigen wir ein Periodensystem der Elemente.

- Bor: Aus der Kernladungszahl $Z = 5$ folgt, dass sich fünf positiv geladene Protonen im Atomkern befinden. Diesen fünf Protonen müssen fünf negativ geladene Elektronen in der Hülle gegenüberstehen. Diese fünf Elektronen sind nun auf Orbitale zu verteilen und zwar unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips! Die Hauptquantenzahl n nimmt die Werte $\{1, 2, 3, \dots\}$, die Drehimpulsquantenzahl l Werte $\{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ an.

- $n = 1, l = 0, m_l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 0, m_l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 1$: 1 Elektron

Ein Orbital bezeichnet man in der Form „ $n l^{\#}$ “, wobei n die Hauptquantenzahl und „ $\#$ “ die Anzahl der Elektronen im Orbital ist. l bezeichnet man hier nicht mit einer Zahl, sondern man führt die Buchstaben s für $l = 0$, p für $l = 1$, d für $l = 2$ usw. ein. Damit lautet die Elektronenkonfiguration von Bor $1s^2 2s^2 2p^1$.

- Schwefel: Aus dem Periodensystem lesen wir ab, dass Schwefel 16 Elektronen besitzt.
- $n = 1, l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
 - $n = 2, l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
 - $n = 2, l = 1, m_l = 1$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$

- $n = 2, l = 1, m_l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 1, m_l = -1$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 3, l = 0, m_l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 3, l = 1, m_l = 1$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 3, l = 1, m_l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$

Also ist die Elektronenkonfiguration: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$.

- Stickstoff: Dieser hat sieben Elektronen, die wir wie folgt auf die Orbitale verteilen:

- $n = 1, l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 0$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 1, m_l = 1$: 2 Elektronen mit $m_s = \pm 1/2$
- $n = 2, l = 1, m_l = 0$: 1 Elektron

Somit hat Stickstoff die Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p^3$.

Aus gegebenen Elektronenkonfigurationen die Elemente abzulesen, ist einfacher, denn im Prinzip ist hier nur die gesamte Anzahl von Elektronen wichtig.

- Konfiguration $1s^2 2s^1$: $2 + 1 = 3$ Elektronen
Das Element Lithium besitzt drei Elektronen.
- Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$: $2 + 2 + 6 + 2 + 1 = 13$ Elektronen
Dabei muss es sich um Aluminium handeln.
- Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$: $2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 2 = 20$ Elektronen
Das Element mit 20 Elektronen ist Calcium.

Aufgabe 30

Kurze Wiederholung: Die Lösung der Schrödingergleichung für ein konstantes Potential V ist aus der Vorlesung bekannt:

- 1.) Klassisch erlaubter Bereich $E > V$: Die Lösung der Schrödingergleichung ist oszillatorisch und kann entweder als Linearkombination von reellen Sinus- und Kosinusfunktionen

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}, \quad (23)$$

oder als Linearkombination von komplexen Exponentialfunktionen

$$\psi(x) = A' \exp(ikx) + B' \exp(-ikx), \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}, \quad (24)$$

geschrieben werden. Welche Darstellung geschickter ist, hängt von der jeweiligen Problemstellung ab.

- 2.) Klassisch verbotener Bereich $E < V$: Die Lösung der Schrödingergleichung setzt sich aus gedämpften und ansteigenden reellen Exponentialfunktionen zusammen:

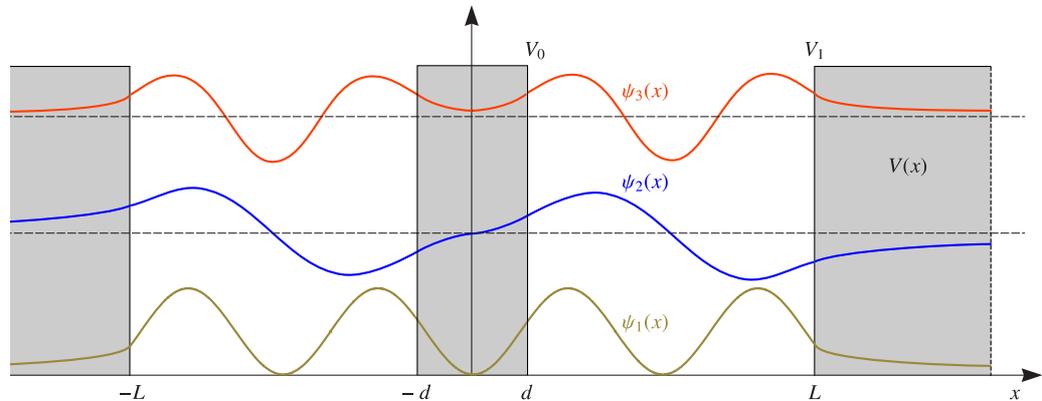
$$\psi(x) = C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x), \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}. \quad (25)$$

Gilt diese Lösung für $x \mapsto -\infty$ bzw. $x \mapsto \infty$ (wie dies für $W < V_1$ in der folgenden Aufgabe der Fall ist), so muss jeweils $D = 0$ bzw. $C = 0$ gesetzt werden, damit $\psi(x)$ im Unendlichen auf Null abfällt.

Diese Lösungen sind dann aneinander anzupassen an den Bereichen, wo das Potential einen Sprung macht. Das Ganze ist so zu tun, dass sowohl $\psi(x)$ (immer!) als auch deren Ableitung $d\psi(x)/dx$ (zumindest in Fällen mit endlichem Potential) stetig ist.

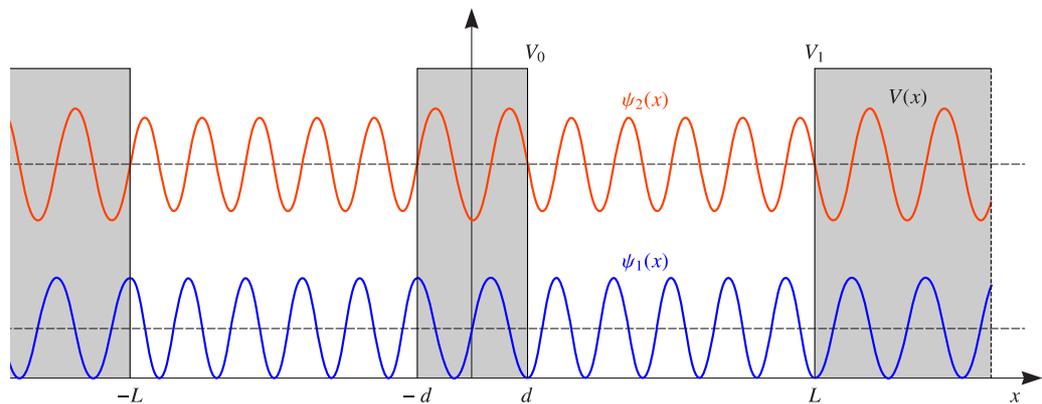
a.)

Da das Potential wieder symmetrisch für Mittelsenkrechten ist, welche durch den Ursprung geht, gibt es analog zum einfachen Potentialtopf achsensymmetrische und punktsymmetrische Wellenfunktionen. Die punktsymmetrischen müssen durch den Ursprung gehen. Achsensymmetrische Wellenfunktionen können, müssen aber nicht, durch den Ursprung gehen. Im Falle $W < V_1$ (was in der Aufgabe wohl gefordert war) muss die Wellenfunktion für $x \mapsto -\infty$ und $x \mapsto \infty$ auf Null abfallen. An den Stellen $x = -L$, $x = -d$, $x = d$ und $x = L$ muss sowohl die Wellenfunktion als auch deren Ableitung stetig sein. Damit ergibt sich im Wesentlichen folgendes Verhalten (ohne Rechnung):



$\psi_1(x)$ ist eine achsensymmetrische Wellenfunktion, die im Ursprung auf Null abfällt. $\psi_2(x)$ ist eine punktsymmetrische Wellenfunktion und $\psi_3(x)$ wieder eine achsensymmetrische, die jedoch dieses Mal nicht durch den Ursprung verläuft.

Der Vollständigkeit halber noch Beispiele für Wellenfunktionen, falls $W > V_1$ ist:



Dann sind alle Bereiche klassisch erlaubt und die Lösung der Schrödingergleichung ist überall oszillierend. In den Bereichen mit verschwindendem Potential ist die Wellenlänge jedoch größer, da dem Teilchen im Prinzip weniger kinetische Energie zur Verfügung steht (siehe Aufgabenteil c). Hier gibt es nur diese zwei Typen von Lösungen und keine drei Typen wie im Fall $W < V_1$. Anmerkung: Die Wellenfunktion ist in diesem Falle übrigens nicht normierbar, weil das Integral von $x = -\infty$ bis $x = \infty$ einer oszillierenden Funktion (deren Amplitude im Unendlichen nicht verschwindet) nicht existiert. Das ist jedoch in der Praxis kein Problem, weil dann der gekoppelte Potentialtopf sowieso nur auf einen endlichen Raumbereich beschränkt ist.

b.)

Für große d handelt es sich im Wesentlichen um zwei Potentialtöpfe der Breite $L - d$, die sehr weit voneinander entfernt sind und somit praktisch als unabhängig betrachtet werden können. Die Wellenfunktionen und Energien in jedem der Potentialtöpfe entspricht dann näherungsweise jenen eines einzelnen Potentialtopfes. Für $d \ll L$ ist die Potentialbarriere in der Mitte sehr dünn und spielt fast keine Rolle mehr. Es liegt dann in guter Näherung ein einziger Potentialtopf der Breite $2L$ mit entsprechenden Wellenfunktionen und Energien vor.

Liegt d in der Größenordnung von L , haben wir einen wirklichen gekoppelten Potentialtopf vorliegen, bei dem eine größere Vielfalt von Wellenfunktionen mit zugehörigen Energien auftritt. Als sind also mehr Energieniveaus vorhanden als dies bei einzelnen Potentialtöpfen der Fall ist. Man sagt auch, dass die Energieniveaus weiter auffächern.

Anmerkung: Etwas Ähnliches spielt sich im Festkörper ab. Ein einfaches Modell für zwei benachbarte Atome ist im Prinzip ein solcher gekoppelter Potentialtopf wie in der Aufgabe. Die Energieniveaus der einzelnen

Atome fächern somit auf, wenn man diese nahe genug zueinander bringt. Bei sehr vielen Atomen (in einem makroskopischen Festkörper ungefähr 10^{23}) ist diese Auffächerung sehr stark; es liegen dann sehr viele Energieniveaus vor und die Energie wird praktisch kontinuierlich. Auf diese Weise lassen sich die Bänder im Festkörper erklären, die wir schon auf dem letzten Übungsblatt kennengelernt haben.

c.)

Für $W_{q_1} > V_1$ (und $V_0 = V_1$) sind alle Gebiete klassisch erlaubt und die Wellenfunktion des Elektrons weist ein oszillatorisches Verhalten auf. In den Gebieten mit $V(x) = 0$ (also zwischen $-L + d$ und $-d$ bzw. d und $L - d$) besitzt das Elektron eine größere kinetische Energie (gegeben durch die Differenz $E - V(x)$) als in den Gebieten mit $V_0 = V_1 \neq 0$. Damit ist den Elektronen in den Bereichen mit verschwindendem Potential eine kleinere Wellenlänge λ , also größere Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ zuzuordnen als in den anderen Bereichen. Für die Wellenzahl gilt nämlich:

$$E - V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}. \tag{26}$$

d.)

Ein klassisches Elektron mit der Energie $W_{k_1} < V_1$ kann im Gegensatz zum quantenmechanischen Elektron in keinsten Weise in das Potential eindringen. Es verhält sich wie ein Ball, das entweder im linken oder rechten Topf mit $V(x) = 0$ hin und her springt. Für $W_{k_2} > V_1$ kann sich das Elektron auch in den Bereichen bewegen, wo das Potential nicht verschwindet. Die Bewegung ist jedoch dann nicht frei, sondern das Elektron erfährt wegen $F = -\partial V(x)/\partial x$ eine Kraft, welche dieses beschleunigt oder abbremst. Im Falle einer Beschleunigung ist es möglich, dass sich das Elektron im weiter vom Ursprung entfernt und immer schneller wird. (Bezieht man die spezielle Relativitätstheorie mit ein, so nähert sich die Geschwindigkeit des Elektrons der Lichtgeschwindigkeit.) Bremsst die Kraft das Elektron, so kommt dieses nur zu maximal vom Ursprung entfernten Orten und kehrt dann um. Nimmt man an, dass die Energie erhalten ist, vollzieht das Elektron eine Schwingung um den Nullpunkt. Der Ort $x(t)$ des klassischen Elektrons kann berechnet und auch gemessen werden; dies ist jedoch in der Quantenmechanik nicht möglich.

e.)

Für $W_{q_2} < V_1$ ist das Elektron in einem der beiden Potentialtöpfe gefangen. Es kann nicht in den jeweils anderen Topf vordringen, da die Wellenfunktion bei $x = -d$ bzw. $x = d$ auf Null abfällt (wegen $V_0 = \infty$). Es kann jedoch in den Potentialbereich mit endlichem V_1 eindringen und besitzt dort eine gewisse Aufenthaltswahrscheinlichkeit, die jedoch stark abnimmt, sofern man sich von $x = -d$ nach links oder $x = d$ nach rechts entfernt.

Für $W_{q_2} > V_1$ kann ein Elektron von links (bzw. rechts) einfliegen und wird an der Stelle $x = -d$ bzw. $x = d$ wieder nach rechts (bzw. links) reflektiert.

f.)

Hier gibt es im Wesentlichen drei Begründungen:

- Die physikalische Nummer 1: Der Impulserwartungswert $\langle \hat{p} \rangle$ verschwindet, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons (also Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$) symmetrisch zum Ursprung ist. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron nach links oder nach rechts bewegt, ist also gleich und man erwartet einen verschwindenden Impuls des Elektrons.
- Die physikalische Nummer 2: Der Impulserwartungswert $\langle \hat{p} \rangle$ muss auf jeden Fall verschwinden, da wir ein zeitunabhängiges (stationäres) Problem betrachten. Im Prinzip haben wir ja nur die zeitunabhängige Schrödingergleichung gelöst und können Aufenthaltswahrscheinlichkeiten berechnen, die jedoch nicht von der Zeit abhängen. Wäre $\langle \hat{p} \rangle \neq 0$, so müsste sich das Elektron durch den Potentialtopf bewegen und damit würde sich auf jeden Fall auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit der Zeit ändern.
- Die mathematische: Der Impulsoperator in einer Dimension ist gegeben durch den Differentialoperator

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{j} \frac{d}{dx}, \tag{27}$$

und ist also komplex. Der Erwartungswert

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x), \tag{28}$$

muss als Erwartungswert einer physikalisch messbaren Größe (Observablen) p (nämlich des Impulses) auf jeden Fall reell sein. Dies erreicht man jedoch nur, wenn auch die Wellenfunktion $\psi(x)$ komplex ist, so dass sich der komplexe Anteil des Impulsoperators mit dem komplexen Anteil der Wellenfunktion wegheben kann. Die Wellenfunktionen im Potentialtopf können jedoch in rein reeller Form geschrieben werden, nämlich immer als Überlagerung von reellen Sinus- und Kosinusfunktionen bzw. reellen Exponentialfunktionen (je nachdem ob die Energie des Elektrons größer oder kleiner als das Potential ist). Damit gibt es für $\langle \hat{p} \rangle$ keine andere Möglichkeit als zu verschwinden ;-)