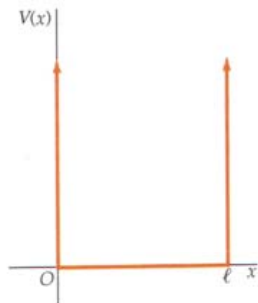


## Teilchen im Kastenpotential

Im folgenden werden wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für den Fall eines in einem eindimensionalen Kasten der Länge  $l$  eingeschlossenen Teilchens lösen.

Die Beschränkung auf eine Raumrichtung ist zwar unrealistisch, sie macht das Problem aber einfacher und kann als lehrreiches Beispiel dienen.



36.6 Das Kastenpotential. Für  $x < 0$  und  $x > l$  ist das Potential unendlich. Das Teilchen ist im Bereich  $0 < x < l$ , in dem das Potential gleich null ist, eingeschlossen.

Nach der klassischen Mechanik bewegt sich das Teilchen zwischen den beiden an den Orten  $x = 0$  und  $x = l$  angenommenen Wänden hin und her. Es hält sich an jedem Ort im Kasten mit derselben Wahrscheinlichkeit auf, und die Energie des Teilchens kann jeden beliebigen Wert annehmen.

In der Quantenmechanik wird das Teilchen jedoch durch eine Wellenfunktion  $\Psi$  beschrieben, die der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung genügt.

Die potentielle Energie oder- wie in der Quantenmechanik üblich- kurz das **Potential**  $V(x)$  nimmt für einen eindimensionalen Kasten die oben dargestellte Form an und lässt sich als

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \Rightarrow 0 < x < l \\ V(x) &= \infty \Rightarrow x < 0 \text{ oder } x > l \end{aligned}$$

beschreiben.

Das Potential wird auch oft als **Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden** bezeichnet, da es außerhalb des Kastens, d.h. außerhalb des Bereichs  $0 < x < l$ , unendlich ist.

Da die Schrödinger-Gleichung in diesem Außenbereich nur die Lösung  $\Psi(x) = 0$  besitzt, ist auch die zu  $|\Psi(x)|^2$  proportionale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens überall außerhalb des Kastens null. Innerhalb des Kastens, d.h. innerhalb des Bereichs  $0 < x < l$ , ist das Potential in jedem Punkt gleich null. Wir müssen daher nur die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lösen, wobei die Stetigkeit der Wellenfunktion in den Punkten  $x = 0$  und  $x = l$  die sog. **Randbedingungen**  $\Psi(x = 0) = 0$  und  $\Psi(x = l) = 0$  liefert, die wir bei der Lösung berücksichtigen müssen.

Die Stetigkeit der Ableitung der Wellenfunktion brauchen wir dagegen nicht zu beachten, da das Potential für  $x < 0$  und  $x > l$  unendlich wird.

Innerhalb des Kastens nimmt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

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

die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = E \Psi(x)$$

bzw.

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = -k^2 \Psi(x)$$

an, wobei

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Die allgemeine Lösung von  $\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = -k^2 \Psi(x)$  kann als

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

geschrieben werden. Darin sind  $A$  und  $B$  noch zu bestimmende Konstanten. Für den Punkt  $x = 0$  gilt

$$\Psi(x = 0) = A \sin k0 + B \cos k0 = B,$$

und die Randbedingung  $\Psi(x = 0) = 0$  liefert somit  $B = 0$ .

Gleichung  $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

nimmt damit die Form

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

an. Die Randbedingung  $\Psi(x = l) = 0$  ergibt

$$\Psi(l) = A \sin kl = 0.$$

Diese Bedingung ist erfüllt, wenn  $kl$  ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$  ist. Die Wellenzahl  $k$  wird somit auf Werte  $k_n$  eingeschränkt, die durch

$$k_n = n \frac{\pi}{l} \text{ für } n = 1; 2; 3 \dots$$

gegeben sind. Für jeden Wert für  $n$  existiert dann eine Wellenfunktion

$$\Psi_n = A_n \sin \frac{n\pi \cdot x}{l}.$$

Drücken wir  $k$  mittels  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  durch die Wellenlänge aus, so lässt sich  $k_n = n \frac{\pi}{l}$  in

$$l = n \frac{\lambda_n}{2}$$

umformen. Dies entspricht gerade der Bedingung für eine **stehende Welle** auf einer an ihren Enden  $x = 0$  und  $x = l$  eingespannten Saite. Da die Energie  $E$  mit der Wellenzahl über

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  zusammenhängt, kann  $E$  nur die Werte

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} = n^2 \frac{h^2}{8ml^2}$$

oder

$$E_n = n^2 E_1$$

annehmen, wobei

$$E_1 = \frac{h^2}{8ml^2}$$

die Grundzustandsenergie, d.h. die Energie des niedrigsten möglichen Zustands ist.

**Die Energie ist also quantisiert.**

Bemerkenswert ist, dass der niedrigste mögliche Energiewert von null verschieden ist. Ein in ein endliches Volumen eingeschlossenes Teilchen kann nach der Quantenmechanik nicht ruhen, sondern besitzt immer eine minimale kinetische Energie, die Nullpunktsenergie.

Auf die Herleitung der normierten Wellenfunktion wird an dieser Stelle verzichtet.

Sie lautet:

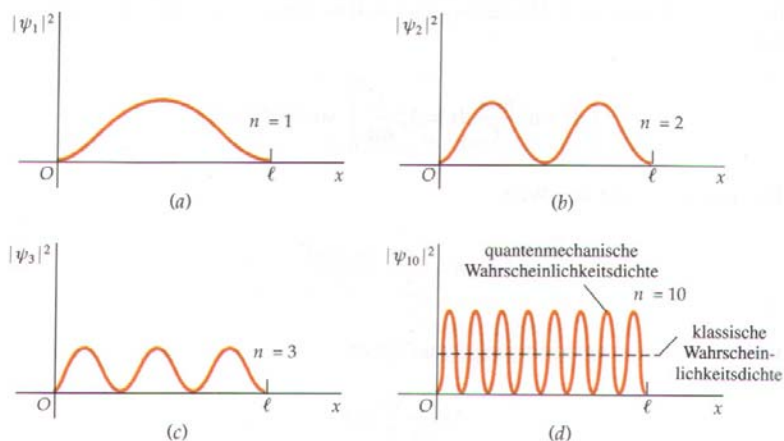
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi \cdot x}{l}$$

Somit ergibt sich nachfolgend die Wahrscheinlichkeitsdichte im Kastenpotential:

*Bohrsches Korrespondenzprinzip*

Im Grenzfalle großer Quantenzahlen ergeben quantenmechanische und klassische Rechnungen dasselbe Resultat.

**36.8** Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  eines Teilchens im Kastenpotential der Breite  $\ell$  in Abhängigkeit von  $x$  für a) den Grundzustand  $n = 1$ , b) den ersten angeregten Zustand  $n = 2$ , c) den zweiten angeregten Zustand  $n = 3$  und d) den Zustand  $n = 10$ . Für große  $n$  liegen die Extrema so nahe beieinander, daß nur der (konstante) Mittelwert von  $|\psi|^2$  beobachtet werden kann. Dieser stimmt dann mit der klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte überein.



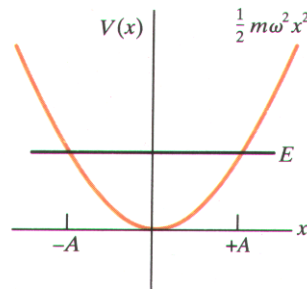
## Der quantenmechanische Oszillator

Wir behandeln nun die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für den Fall eines eindimensionalen harmonischen Oszillators, dessen Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

lautet, wobei  $\omega$  die Kreisfrequenz ist.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für dieses in der nachfolgenden Abbildung dargestellten Potential ist von besonderem Interesse, da sich das Resultat in einer Vielzahl von Problemen anwenden lässt, so etwa bei Schwingungen von Molekülen und in Festkörpern.



**36.15** Das Potential für einen harmonischen Oszillator. Klassisch ist das Teilchen im Bereich  $-A < x < +A$  eingeschlossen.

Nach der klassischen Mechanik kann ein Teilchen im Potential  $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$  entweder im Punkt  $x = 0$  ruhen (das Potential ist im Ursprung minimal und die auf das Teilchen wirkende Kraft  $F = -\frac{dV(x)}{dx}$  somit gleich null) oder zwischen zwei Punkten  $x = -A$  und  $x = +A$ , den sog. klassischen Umkehrpunkt, oszillieren.

Im ersten Fall ist die Gesamtenergie  $E$  des Teilchens gleich null, im zweiten besitzt das Teilchen eine Gesamtenergie

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2,$$

denn in den Umkehrpunkten ist die kinetische Energie des Teilchens gleich null und seine Gesamtenergie ist gleich der potentiellen Energie in diesen Punkten.

Das Teilchen kann jeden positiven Wert für die Gesamtenergie  $E$  annehmen.

In der klassischen Mechanik ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einer Umgebung  $dx$  eines Punktes  $x$  zu finden, proportional zu Zeit  $dt = \frac{dx}{v}$ , die es in diesem Bereich verbringt.

Die Geschwindigkeit  $v$  lässt sich einfach aus der Energieerhaltung gewinnen:

$$\frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = E.$$

Für die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in der Umgebung des Punktes  $x$  gilt daher:

$$P_{klass}(x)dx \propto \frac{dx}{v} = \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)}}$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung nimmt für den Fall des harmonischen Oszillators die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x) = E \Psi(x)$$

an. Diese Gleichung lässt sich mit den in der theoretischen Physik üblichen Methoden lösen, was für unsere Zwecke jedoch zu langwierig ist.

Wir beschränken uns deshalb auf eine qualitative Diskussion.

Zunächst einmal stellen wir fest, dass das potential symmetrisch bezüglich des Ursprungs ist.

Das zu Wahrscheinlichkeitsverteilung proportionale Betragsquadrat der Wellenfunktion,

$|\Psi(x)|^2$ , muss also ebenfalls symmetrisch um den Ursprung sein:

$$|\Psi(-x)|^2 = |\Psi(x)|^2.$$

Auf Grund der Symmetrie können wir unsere Suche nach einer Lösung auf den Bereich positiver  $x$ -Werte beschränken.

Ist  $E$  die Gesamtenergie des Teilchens, so lassen sich die klassischen Umkehrpunkte des

Teilchens durch  $E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$  bestimmen.

Für  $x > A$  gilt dagegen  $E < V(x)$ . Die Ergebnisse aus der Rechnung zum Potentialtopf (**endlich** hohe Wände) lassen sich direkt übertragen:

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für  $x > A$  lautet:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \Psi(x),$$

wobei

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)).$$

Die Wellenfunktion ist immer zur  $x$ -Achse hin gekrümmt und oszilliert. Für  $x > A$  lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = +\alpha^2 \Psi(x),$$

mit

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)),$$

und die Wellenfunktion krümmt sich von der x-Achse weg. Wieder sind nur bestimmte Energiewerte erlaubt, die auf quadratintegrale und somit normierbare Wellenfunktionen führen.

In diesem Fall ergeben sich die möglichen Energiewerte zu:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \text{ mit } n = 1; 2; 3 \dots$$

In der nachfolgenden Abbildung sind die Wellenfunktionen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes dargestellt. Die Wellenfunktion des Grundzustandes ist eine gaußförmige und symmetrisch.

Die Zahl  $n$  wird auch hierbei als Quantenzahl bezeichnet.