

## Moderne Physik

### 35. Anwendungen der Schrödinger-Gleichung (Applications of the Schrödinger equation)

Tipler-Mosca  
Physik

#### 35.1 Die Schrödinger-Gleichung (The Schrödinger equation)

#### 35.2 Ein Teilchen im Kasten mit endlich hohem Potential (A particle in a finite square well)

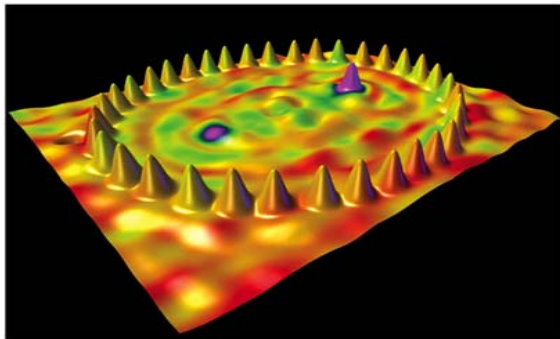
#### 35.3 Der harmonische Oszillator (The harmonic oscillator)

#### 35.4 Reflexion und Transmission von Elektronenwellen an Potentialbarrieren (Reflection and transmission of electron waves: barrier penetration)

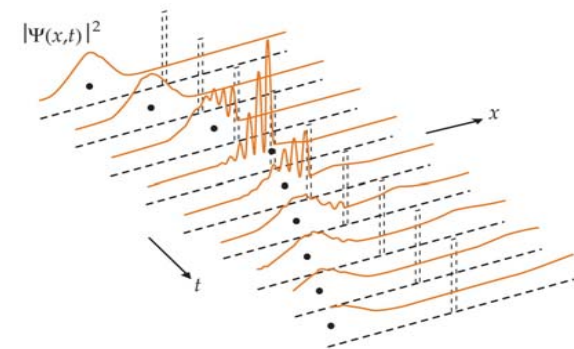
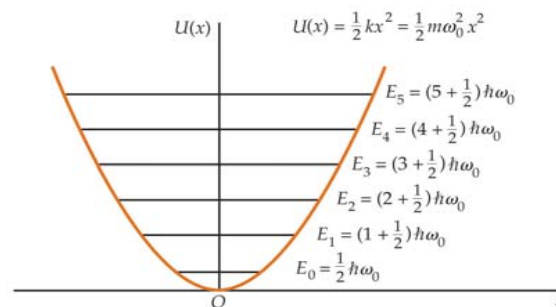
#### 35.5 Die Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen (The Schrödinger equation in three dimensions)

#### 35.6 Die Schrödinger-Gleichung für zwei identische Teilchen (The Schrödinger equation for two identical particles)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad 35-1$$



TIME-DEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION





## 35.1 Die Schrödinger-Gleichung (The Schrödinger equation)

Die Schrödinger-Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung in Raum und Zeit, die (derzeit) nicht abgeleitet werden kann  $\Leftrightarrow$  ihre Gültigkeit geht aus der Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen hervor:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad 35-1$$

$E_{\text{pot}} = U$  ist darin die potentielle Energie

TIME-DEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung setzt die zweite räumliche Ableitung der Wellenfunktion  $\psi$  mit deren erster zeitlicher Ableitung in Beziehung, ferner enthält sie die imaginäre Zahl  $i = \sqrt{-1} \Rightarrow$  Lösungen der Gleichung können komplex sein (Realteil + Imaginärteil)  $\Rightarrow \psi$  ist nicht meßbar (derzeit), aber die  $\psi^* \psi = |\psi(x, t)|^2$  gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte (reell)  $\Rightarrow$  die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Intervall  $dx$  zu finden, ist gegeben durch  $P(x, t)dx = |\psi(x, t)|^2 dx = \psi^* \psi dx$

Komplexe Zahl:  $z = a + ib$  wobei  $a$  und  $b$  reell und  $i = \sqrt{-1}$ , zu  $z$  komplex konjugierte Zahl:  $z^* = a - ib \Rightarrow z^* z = (a - ib)(a + ib) = a^2 + b^2 = |z|^2$  (siehe Anhang D)

<http://www.mathe-online.at/lernpfade/complex/>

Eine Wellenfunktion für stehende Wellen kann immer als Produkt einer ortsabhängigen Funktion und einer zeitabhängigen Funktion ausgedrückt werden  $\Rightarrow$  Lösungen der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung für stehende Wellen  $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$  wobei  $e^{-i\omega t} = \cos \omega t - i \sin \omega t$  (siehe Anhang D)  $\Rightarrow$  aus rechter Seite von Gl. (35.1)  $i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)\psi(x)e^{-i\omega t} = \hbar\omega\Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$  mit  $E = \hbar\omega \Rightarrow$  die Schrödinger-Gleichung hat nur dann Lösungen für stehende Wellen, wenn  $E_{\text{pot}}$  alleine vom Ort abhängt, d.h.  $E_{\text{pot}}(x) \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$  in Gl. (35.1) eingesetzt und gemeinsamer Faktor  $e^{-i\omega t}$  eliminiert  $\Rightarrow$  zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung  $\Rightarrow$

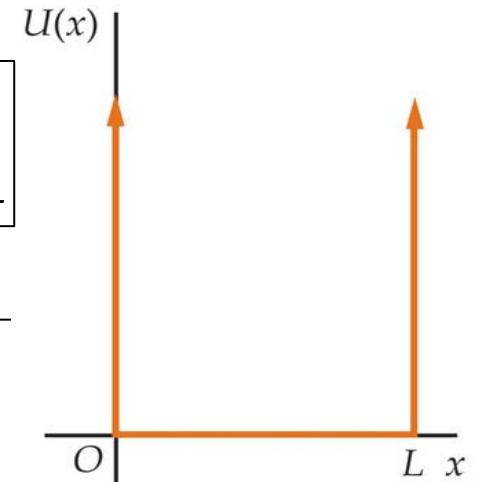
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad 35-4$$

$E_{\text{pot}}(x) = U(x)$  ist darin die potentielle Energie

### TIME-INDEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION

#### Ein Teilchen im Kasten mit unendlich hohem Potential

Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden  $\Rightarrow$   
 das Teilchen ist zwischen  $0 < x < L$  eingeschlossen  $\Rightarrow$   
 $E_{\text{pot}}(x) = 0$  für  $0 < x < L$  und  $E_{\text{pot}}(x) = \infty$  für  $x < 0$  und für  $x > L$



Teilchen befindet sich im Kasten  $\Rightarrow$  außerhalb  $\psi(x) = 0 \Rightarrow$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung im Kasten:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow$

$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$  wobei  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow$  allgemeine Lösung  $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

$\Rightarrow$  bei  $x=0$  ist  $\psi(x=0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B \Rightarrow$

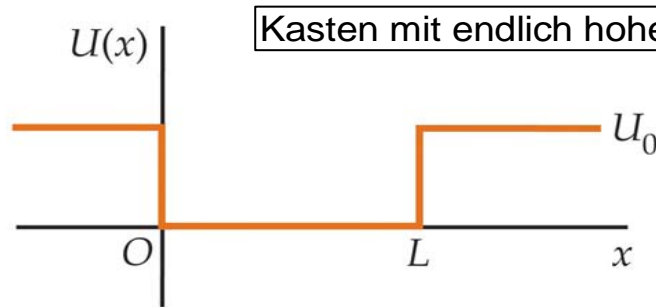
wegen Randbedingung  $\psi(x=0) = 0 \Rightarrow B=0 \Rightarrow \psi(x) = A\sin kx$ ,

wegen Randbedingung  $\psi(x=L) = 0 \Rightarrow \psi(L) = A\sin kL = 0 \Rightarrow k_n L = n\pi$  wobei  $n = 1, 2, 3, \dots$

bzw.  $k_n = n\frac{\pi}{L}$  wobei  $n = 1, 2, 3, \dots \Rightarrow \psi(x) = A\sin k_n x = A\sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) \Leftrightarrow$  vergleiche (34.25),

mit Gl. (35.8)  $k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = n^2 \frac{h^2}{8mL^2} = n^2 E_1$  wobei  $E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \Leftrightarrow$  vergleiche Gl. (34.22)

## 35.2 Ein Teilchen im Kasten mit endlich hohem Potential (A particle in a finite square well)



Kasten mit endlich hohem Potential

$$E_{\text{pot}}(x) = 0 \text{ für } 0 < x < L \text{ und } E_{\text{pot}}(x) = W_0 \text{ für } x < 0 \text{ und für } x > L$$

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung hängt ab, ob die Gesamtenergie  $E$  größer oder kleiner als  $W_0$  ist  $\Rightarrow$

für  $E > W_0$  ist das Teilchen nicht eingeschlossen  $\Leftrightarrow$  jeder Energiewert erlaubt  $\Leftrightarrow$  keine Quantisierung;

für  $E < W_0$  ist das Teilchen eingeschlossen  $\Leftrightarrow$  nur diskrete Energiewerte erlaubt  $\Leftrightarrow$  Energiequantisierung;

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung **innerhalb** des Kastens:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$

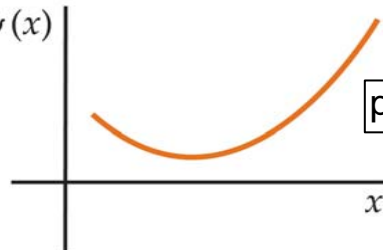
wobei  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow$  allgemeine Lösung  $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \Rightarrow$  bei  $x=0$  ist  $\psi(x=0) \neq 0$ ;

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung **außerhalb** des Kastens:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + W_0\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow$

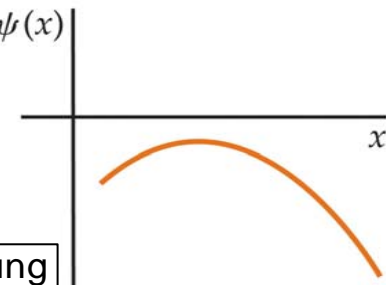
$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \alpha^2\psi(x) = 0$  wobei  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - W_0) \Rightarrow$  ohne Beweis  $\psi(x) = Ce^{-\alpha x}$  für  $x > 0$ ;

an den Kastengrenzen muß ( $x=0$  und  $x=L$ ) muß  $\psi(x)$  und  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  stetig sein, und wegen  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \alpha^2\psi(x)$

muß  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  (Krümmung der Wellenfunktion) das gleiche Vorzeichen wie  $\psi(x)$  haben:  $\psi(x)$

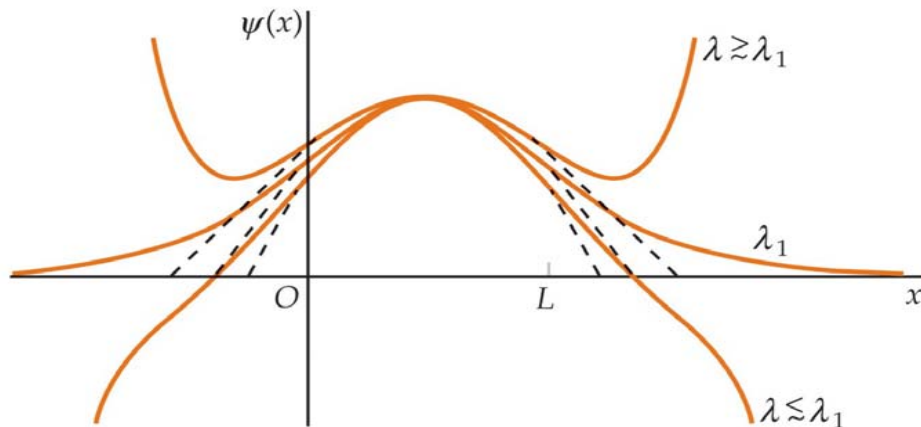


positive Funktion mit positiver Krümmung



negative Funktion mit negativer Krümmung

wegen  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$  haben innerhalb des Kastens  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  und  $\psi(x)$  entgegengesetztes Vorzeichen



Drei Lösungen der Schrödinger-Gleichung beim Kasten mit endlich hohem Potential. Energie  $E_1$  des Grundzustandes aus

$$k_1^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda_1}\right)^2 = \frac{2mE_1}{\hbar^2} \Rightarrow E_1 = \frac{h^2}{2m\lambda_1^2}$$

für  $\lambda \neq \lambda_1$  ist  $\psi$  nicht normierbar (quadratintegrabel)

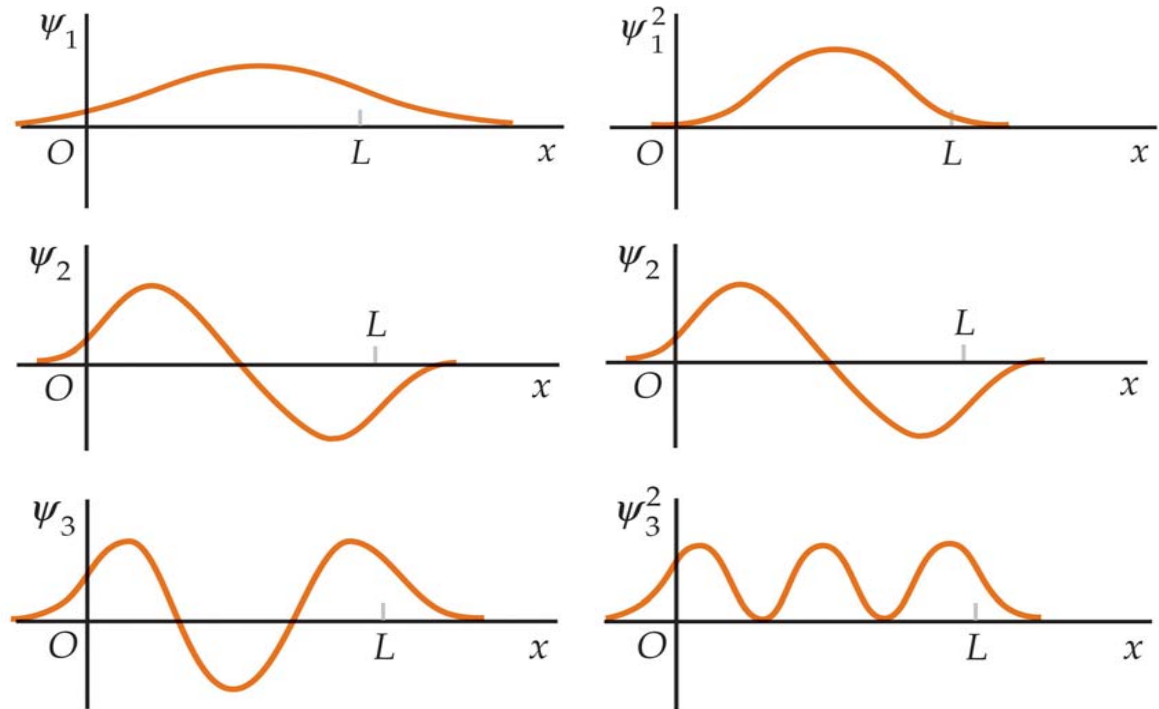
Kasten mit endlich hohem Potential:

Wellenfunktionen  $\psi_n(x)$  und

Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\psi_n^2(x)$  für  $n = 1, 2, 3$ .

Aus Vergleich mit Kasten mit unendlich hohem Potential  $\Rightarrow$  Wellenlängen etwas größer  $\Rightarrow$  Energien etwas niedriger als beim Kasten mit unendlich hohem Potential.

$\psi(x)$  erstreckt sich über die Ränder des Kastens hinaus (klassisch verbotener Bereich  $\hat{=} E_{\text{kin}} < 0$ )  $\Rightarrow$  führt zur Möglichkeit, Potentialbarrieren durchzudringen (Tunneleffekt)

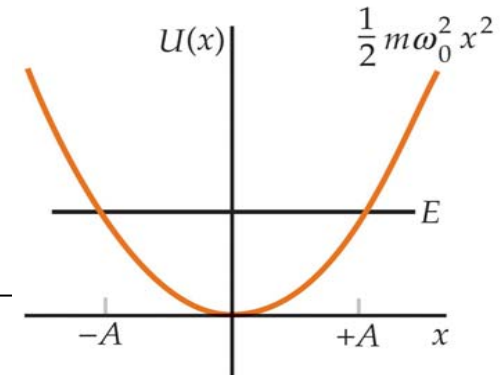


**35.3 Der harmonische Oszillator (The harmonic oscillator)**

Masse  $m$  an einer Feder mit Federkonstant  $k_F \Rightarrow$

potentielle Energie  $E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} k_F x^2 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$  wobei  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_F}{m}}$  Eigenfrequenz,

Gesamtenergie  $E = \frac{1}{2} m \omega_0^2 A^2$



Innerhalb des klassischen Umkehrpunkte: Schrödinger-Gleichung  $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -k^2 \psi(x)$

wobei  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_{\text{pot}}(x)) \Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$  und  $\psi(x)$  haben entgegengesetzte Vorzeichen;

außerhalb des klassischen Umkehrpunkte: Schrödinger-Gleichung  $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = +\alpha^2 \psi(x)$

wobei  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{pot}}(x) - E) > 0 \Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$  und  $\psi(x)$  haben gleiche Vorzeichen;

$\Rightarrow$  es existieren nur für bestimmte Werte von  $E$  Lösungen, die für  $x \rightarrow \pm \infty$  gegen null gehen

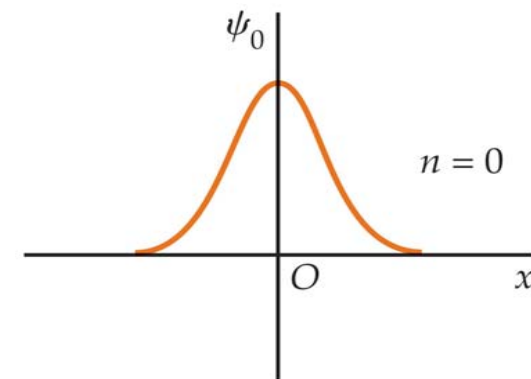
**Wellenfunktionen und Energieniveaus**

Ohne Beweis:

Wellenfunktion  $\psi_0(x)$  des Grundzustandes des harmonischen Oszillators:

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-ax^2},$$

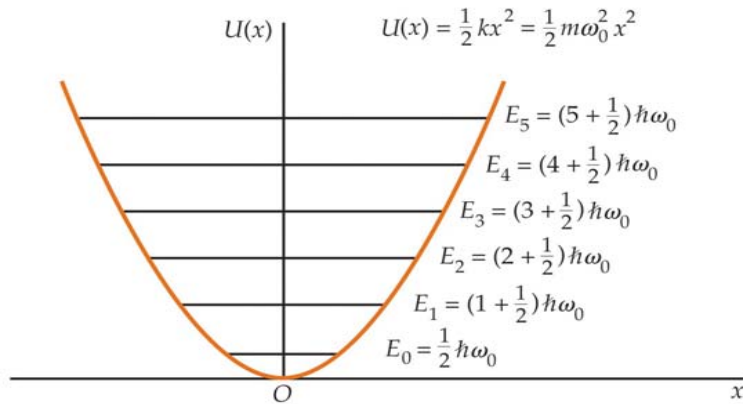
$$\text{Energie des Grundzustandes } E_0 = \frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$$



Wellenfunktion  $\psi_0(x)$  des ersten angeregten Zustandes des harmonischen Oszillators:

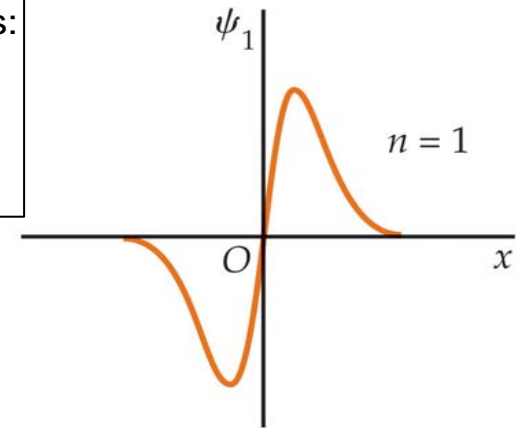
$$\psi_1(x) = A_1 x e^{-ax^2},$$

Energie des ersten angeregten Zustandes  $E_1 = 3 \frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$



Energie des  $n$ -angeregten Zustands des harmonische Oszillators

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \quad \text{wobei } n = 0, 1, 2, \dots$$



Beispiel 35.1: Die Wellenfunktion für den Grundzustand des harmonischen Oszillators

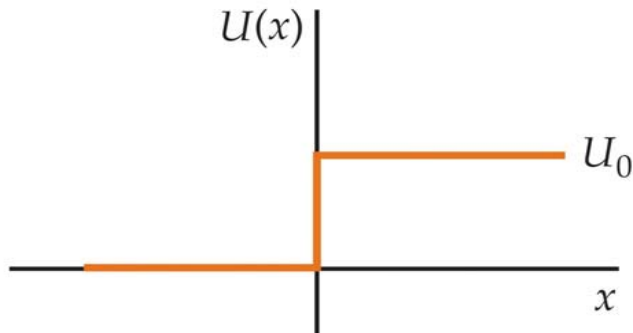
mögliches Prüfungsbeispiel



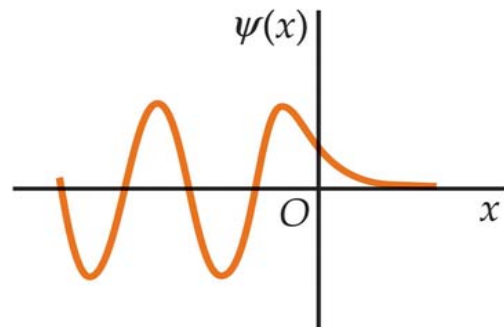
### 35.4 Reflexion und Transmission von Elektronenwellen an Potentialbarrieren (Reflection and transmission of electron waves: barrier penetration)

Betrachtung von nicht gebundenen Zuständen  $\Leftrightarrow E > E_{\text{pot}}(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  und  $\psi(x)$  haben entgegengesetzte Vorzeichen  $\Rightarrow \psi(x)$  zur Achse hin gekrümmt  $\Rightarrow \psi(x)$  bleibt endlich für  $|x| \rightarrow \infty$

#### Das Stufenpotential



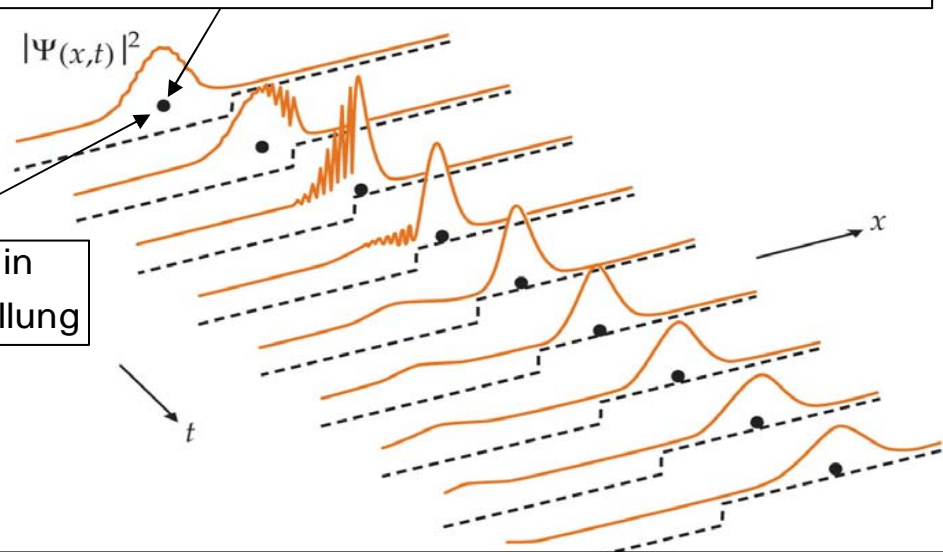
Potentielle Energie  $E_{\text{pot}}(x) = U(x)$  als Stufenfunktion:  
 $E_{\text{pot}}(x) = 0$  für  $x < 0$ ,  $E_{\text{pot}}(x) = W_0$  für  $x > 0$



Wellenfunktion für  $E < W_0 \Rightarrow$   
 an der Potentialstufe wird keine Energie transmittiert

klassisch: aus  $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}(x) = \frac{1}{2}mv^2 + E_{\text{pot}}(x) \Rightarrow$   
 links von der Stufe  $E_{\text{pot}}(x) = 0 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \Rightarrow$   
 für  $E < W_0 \Rightarrow$  Teilchen an der Stufe reflektiert,  
 für  $E > W_0 \Rightarrow$  Teilchen bewegt sich mit  $v = \sqrt{\frac{2(E - W_0)}{m}}$

Position des Teilchens in  
 der klassischen Darstellung



Zeitliche Entwicklung eines eindimensionalen Wellenpakets, das ein auf eine Potentialbarriere treffendes Teilchen mit Energie  $E > W_0$  repräsentiert

Aus Wellen theorie: eine Wellen, deren Wellenlänge sich plötzlich ändert, wird teilweise reflektiert und teilweise transmittiert  $\Rightarrow$  Reflexionskoeffizient  $R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$  wobei  $k_1$  Wellenzahl der einfallenden Welle und  $k_2$  Wellenzahl der transmittierten Welle (vergleiche Gl. (31.11) für Lichtwellen bei senkrechtem Einfall)  $\Rightarrow$  Summe der Transmission  $T$  und der Reflexion  $R$  muß gleich eins sein:  $T + R = 1$

In der Quantenmechanik wird ein lokalisiertes Teilchen durch ein Wellenpaket dargestellt, mit Maximum bei der wahrscheinlichsten Position des Teilchens

Beispiel 35.2: Reflexion und Transmission an einem Stufenpotential

Teilchen mit Energie  $E_0$  bewegt sich in einem Bereich mit  $E_{\text{pot}} = 0$ , trifft auf Potentialbarriere mit  $W_0 = 0.2E_0 \Rightarrow$  Gesucht: Wahrscheinlichkeit der Reflexion des Teilchens an der Barriere:

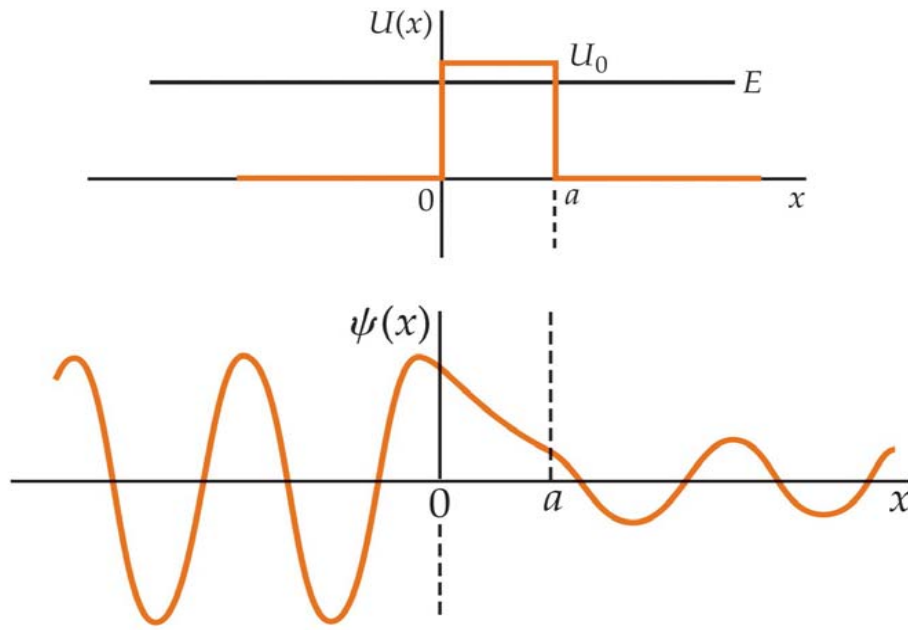
es gilt Gl. (35.27)  $R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$

mit  $E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = E_0 \Rightarrow$  vor der Barriere  $E_{\text{pot}} = 0 \Rightarrow E_{\text{kin}} = \frac{p_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = E_0 \Rightarrow k_1 = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}},$

nach der Barriere  $E_{\text{pot}} = 0.2E_0 \Rightarrow E_{\text{kin}} = E_0 - E_{\text{pot}} = 0.8E_0 \Rightarrow \frac{p_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = 0.8E_0 \Rightarrow k_2 = \sqrt{\frac{1.6mE_0}{\hbar^2}} \Rightarrow$

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(\sqrt{2} - \sqrt{1.6})^2}{(\sqrt{2} + \sqrt{1.6})^2} = 0.00316 = 0.316\%$$

## Transmission durch Potentialbarrieren



Rechteckige Potentialbarriere:

$$E_{\text{pot}}(x) = 0 \quad \text{für } x < 0$$

$$E_{\text{pot}}(x) = W_0 \text{ bzw. } U_0 \quad \text{für } 0 < x < a$$

$$E_{\text{pot}}(x) = 0 \quad \text{für } x > a$$

Durchdringung der Barriere durch eine Welle mit einer Gesamtenergie  $E < W_0$ . Ein Teil der Welle wird durch die Barriere transmittiert.

Links von der Barriere liegen sowohl eine einfallende und als auch eine reflektierte Welle vor  $\Rightarrow$  bilden eine resultierende Welle.

Rechts von der Barriere liegt nur die transmittierte Welle vor.

Mit Gl. (35.18)  $\alpha = \sqrt{\frac{2m(W_0 - E)}{\hbar^2}}$ , Breite  $a$  der Potentialbarriere und  $\alpha a = \sqrt{\frac{2ma^2(W_0 - E)}{\hbar^2}} \gg 1$  ist der Transmissionskoeffizient  $T$  proportional zu  $e^{-2\alpha a}$ :

$$T \propto e^{-2\alpha a}$$

35-29

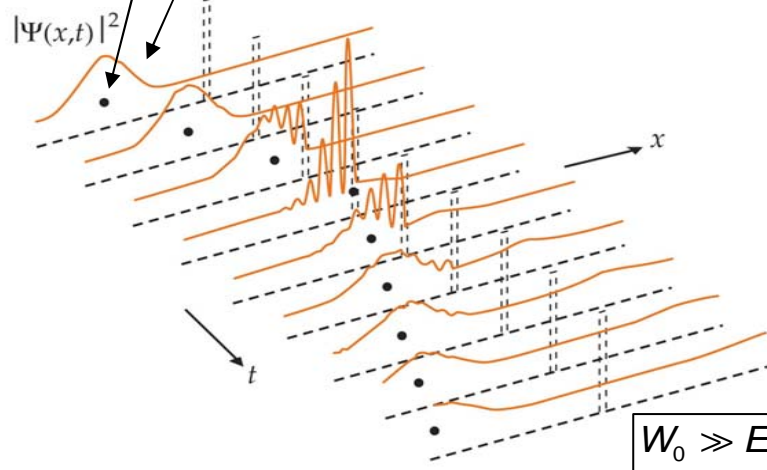
## TRANSMISSION THROUGH A BARRIER

Die Wahrscheinlichkeit der Barrierendurchdringung sinkt exponentiell mit der Barrierenbreite  $a$  und mit der Quadratwurzel der relativen Barrierenhöhe  $(W_0 - E)$ .

klassisches Teilchen

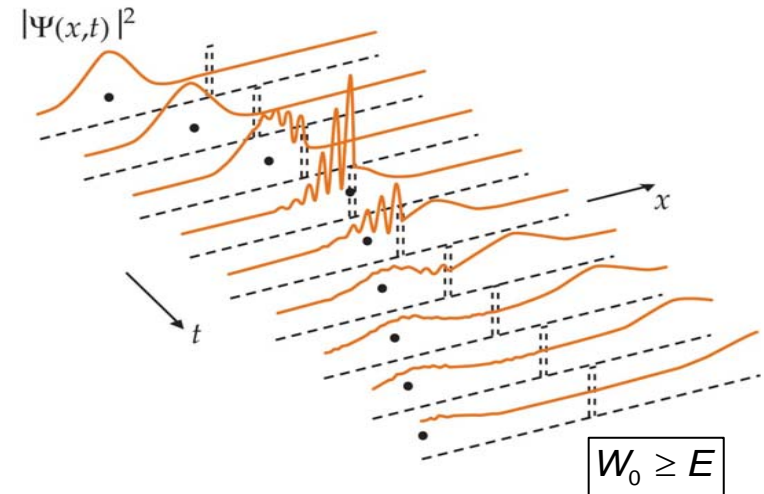
Teilchen als Wellenpaket

Transmission durch eine Barriere



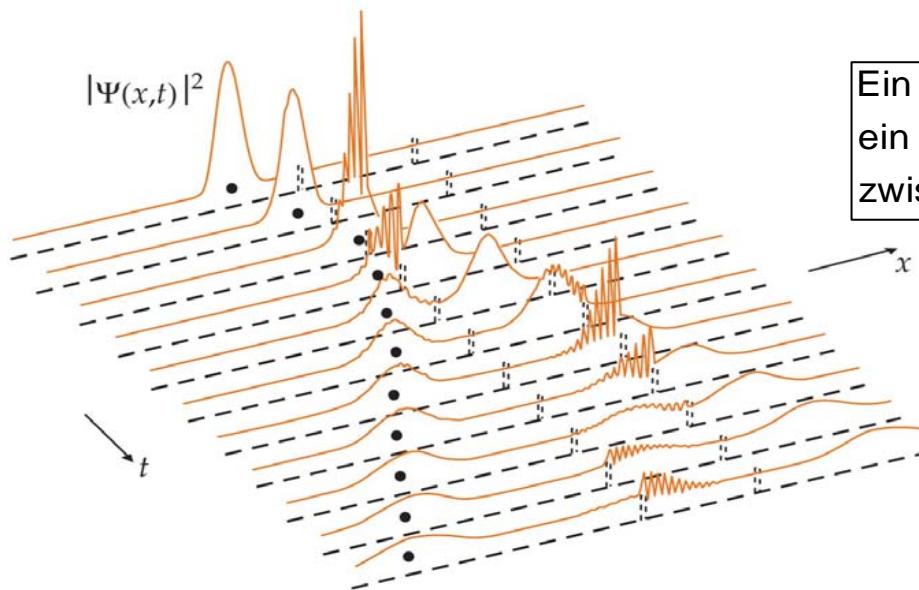
$$W_0 \gg E$$

Nur ein kleiner Teil des Wellenpaketes durchdringt die Barriere



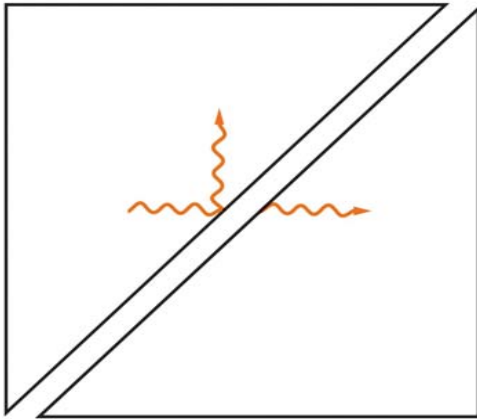
$$W_0 \geq E$$

Die Wahrscheinlichkeiten der Transmission und Reflexion sind ungefähr gleich.

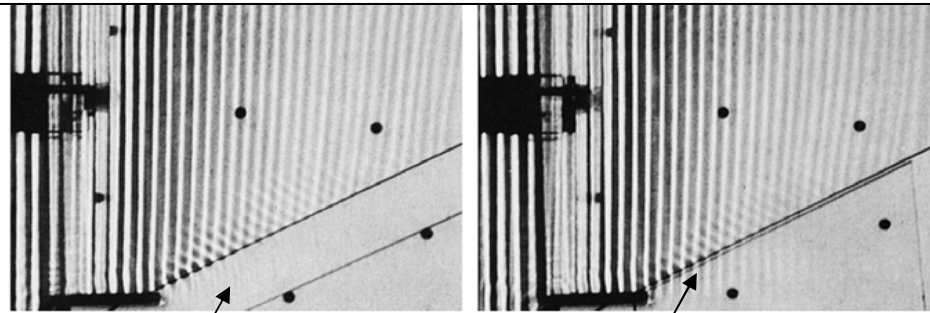
Ein Teilchen als Wellenpaket trifft auf zwei Potentialbarrieren  $\Rightarrow$  ein kleiner Teil des Wellenpakets bleibt für eine gewisse Zeit zwischen den Barrieren eingeschlossen.

### Durchdringung einer optischen Barriere:

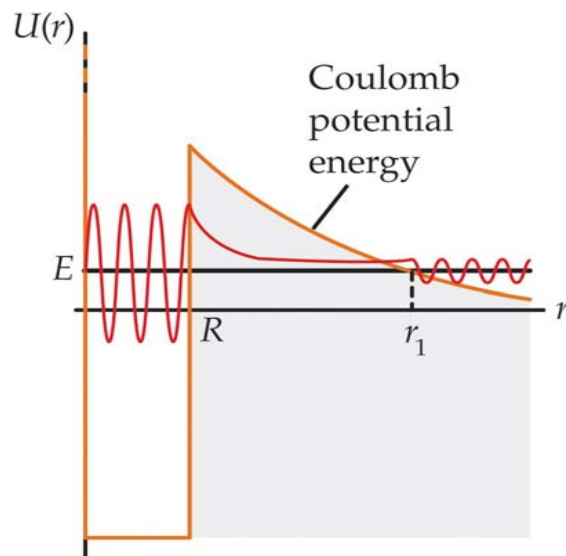
ein Teil der Lichtwelle durchdringt den Luftspalt, wenn der Einfallswinkel im ersten Prisma größer als der kritische Winkel der Totalreflexion ist, und der Abstand der beiden Prismen nur wenige Wellenlängen ausmacht.



### Wasserwellen in einer Wanne durchdringen eine Barriere



breiter Graben

schmaler Graben  $\Rightarrow$  transmittierte Welle sichtbar

Modell der potentiellen Energie für ein Alphateilchen in einem radioaktiven Kern. Innerhalb des Kerns ( $r < \text{Kernradius } R$ ) wirkt eine hohe Anziehungskraft (Kernkräfte), dargestellt durch ein Kastenpotential.

Außerhalb des Kerns ist diese Anziehungskraft vernachlässigbar  $\Rightarrow$  Potential

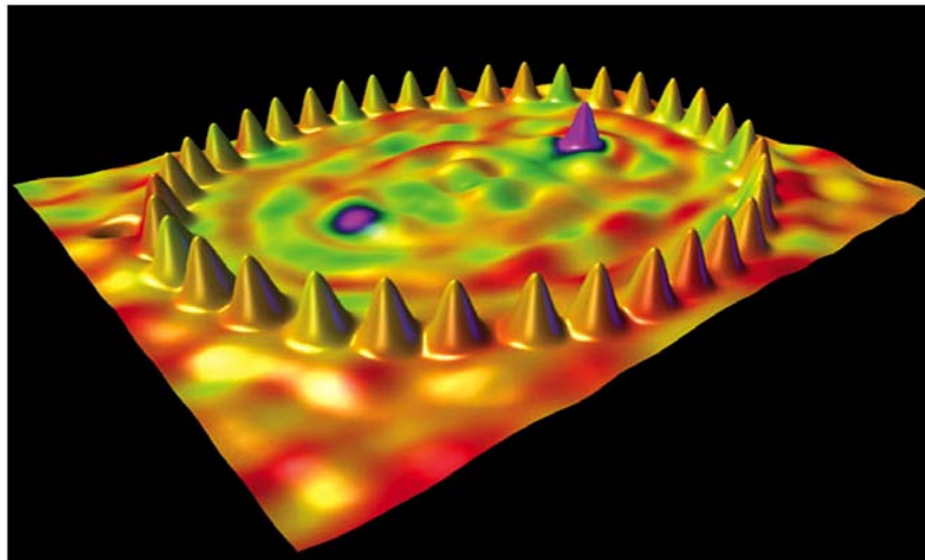
gehört dem Coulomb'schen Gesetz:  $E_{\text{pot}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} 2e \frac{Ze}{r}$ , wobei

$2e$  Ladung des Alpha-Teilchens, und  $Ze$  restliche Kernladung.

Die Wahrscheinlichkeit der Transmission hängt stark von der Breite und der relativen Barrierenhöhe ab  $\Rightarrow$  eine geringe Zunahme von  $E$  führt zu einem starken Anstieg der Transmissionswahrscheinlichkeit und damit zu einer kürzeren Lebensdauer des (radioaktiven) Kernes

**Rastertunnelmikroskop****Rastertunnelelektronenmikroskop:**

ein dünner Spalt zwischen Substanzprobe und Sonde wirkt als Barriere für die in der Probe gebundenen Elektronen  $\Rightarrow$  zwischen Sonde und Probe wird eine geringe elektrische Spannung angelegt  $\Rightarrow$  wenn der Abstand klein genug ist  $\Rightarrow$  die Elektronen tunneln durch das Vakuum, die beide Oberflächen voneinander trennt  $\Leftrightarrow$  der Tunnelstrom hängt sehr stark vom Abstand ab  $\Rightarrow$  beim Abtasten der Oberfläche wird der Strom konstant gehalten  $\Rightarrow$  Auf- und Ab-Bewegung der Sonde bildet die Oberfläche der Probe ab  $\Leftrightarrow$  Auflösung im Atomdurchmesserbereich.



<http://www.quarks.de/quanten/05.htm>

<http://de.wikipedia.org/wiki/Rastertunnelmikroskop>

## 35.5 Die Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen (The Schrödinger equation in three dimensions)

$$\text{Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen: } -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_{\text{pot}} \psi = E \psi$$

Teilchen in einem dreidimensionalen Kasten mit unendlich hohem Potential:  $E_{\text{pot}}(x, y, z) = 0$  für  $0 < x < d$

bzw.  $0 < y < d$  bzw.  $0 < z < d$ , und  $E_{\text{pot}}(x, y, z) = \infty$  außerhalb des würfelförmigen Bereiches  $\Rightarrow$

$\psi(x, y, z) = 0$  an den Rändern des Kastens  $\Rightarrow$

ohne Beweis: Lösung  $\psi(x, y, z) = A \sin(k_1 x) \sin(k_2 y) \sin(k_3 z)$  wobei  $A$  durch die Normierungsbedingung festgelegt wird  $\Leftrightarrow$  Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall  $dx, dy, dz$  zu finden:  $\psi^2(x, y, z) dx dy dz$

$\Rightarrow$  Lösung eingesetzt in Gl. (35.30)  $\Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$  wobei  $p_x = \hbar k_1$  usw.  $\Rightarrow$

$\psi(x, y, z) = A \sin(k_1 x) \sin(k_2 y) \sin(k_3 z) = 0$  bei  $x = d$  wenn  $k_1 = \frac{n_1 \pi}{d}$ , bzw. für bei  $y = d$  wenn  $k_2 = \frac{n_2 \pi}{d}$ , bzw.

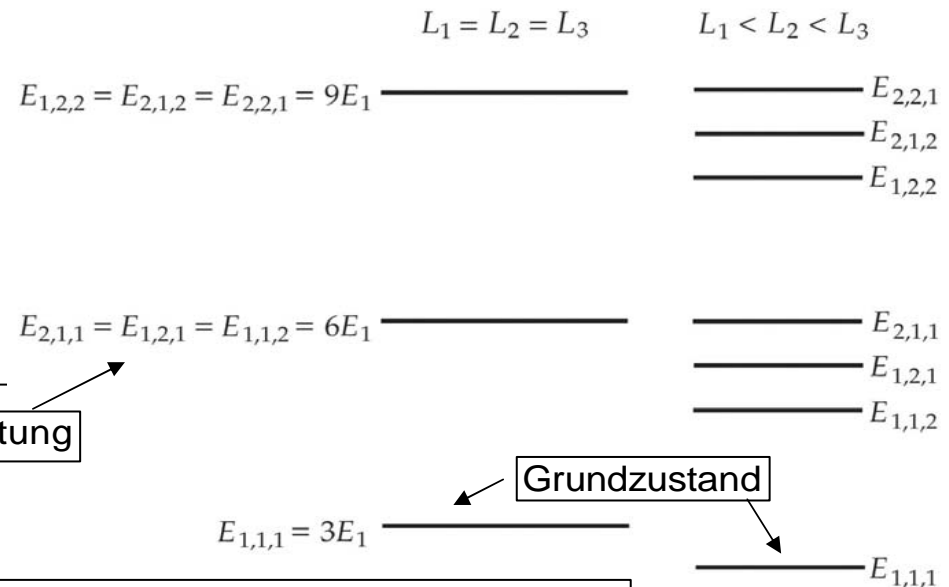
bei  $z = d$  wenn  $k_3 = \frac{n_3 \pi}{d} \Rightarrow$

die Energie ist quantisiert:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

wobei  $n_1, n_2, n_3$  ganze Zahlen und

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \text{ Energie des eindimensionalen Kastens}$$



Ein Energieniveau, das mit mehr als eine Wellenfunktion verknüpft ist, nennt man entartet

Beispiel 35.3: Energieniveaus eines Teilchens in einem dreidimensionalen Kasten

Beispiel 35.4: Wellenfunktionen für ein Teilchen in einem dreidimensionalen Kasten

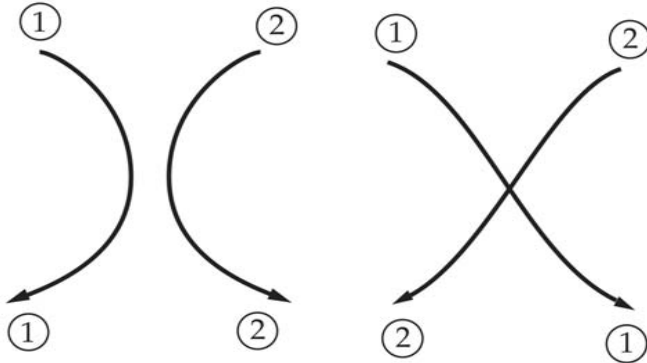
mögliches Prüfungsbeispiel



### 35.6 Die Schrödinger-Gleichung für zwei identische Teilchen (The Schrödinger equation for two identical particles)

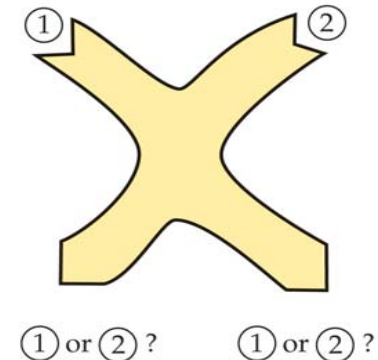
Die Schrödinger-Gleichung für ein Atom mit zwei oder mehr Elektronen ist nicht exakt zu lösen  $\Rightarrow$  Anwendung von Näherungsverfahren.

Komplikation quantenmechanischer Natur: Die Elektronen sind nicht unterscheidbar.



Die Bahnen klassischer Teilchen können verfolgt werden und die Teilchen jederzeit identifiziert werden.

Aufgrund der quantenmechanischen Welleneigenschaften der Elektronen (Heisenberg'sche Unschärferelation) sind deren Bahnen verschmiert. Außerdem ist es unmöglich zu entscheiden, welches Elektron welches ist, nachdem sie sich getrennt haben.



Betrachtung von zwei gleichen, nicht wechselwirkenden Teilchen mit Masse  $m$ , die sich in einem eindimensionalen Kasten mit unendlich hohem Potential bewegen  $\Rightarrow$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} + E_{\text{pot}} \psi(x_1, x_2) = E \psi(x_1, x_2)$$

wobei  $E_{\text{pot}} = E_{\text{pot},1}(x_1) + E_{\text{pot},2}(x_2)$  da Annahme nicht wechselwirkende Teilchen  $\Rightarrow$

Lösung  $\psi_{n,m} = \psi_n(x_1) \psi_m(x_2)$  wobei  $\psi_n$  und  $\psi_m$  Ein-Teilchen-Wellenfunktionen für jeweils ein Teilchen in einem Kasten mit unendlich hohem Potential,  $n$  und  $m$  Quantenzahlen für Teilchen 1 bzw. 2.

Wahrscheinlichkeit, Teilchen 1 im Intervall  $dx_1$  und Teilchen 2 im Intervall  $dx_2$  zu finden:

$$\psi_{n,m}^2(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \psi_n^2(x_1) dx_1 \psi_m^2(x_2) dx_2;$$

Teilchen ununterscheidbar  $\Rightarrow$  mathematische Beschreibung identischer Teilchen müssen diesselben sein, wenn man ihre Bezeichnung austauscht  $\Rightarrow \psi^2(x_1, x_2) = \psi^2(x_2, x_1) \Rightarrow$  Bedingung erfüllt, wenn  $\psi(x_1, x_2)$  entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich Vertauschung der Teilchen ist:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) \Leftrightarrow \text{symmetrisch} \quad \text{oder} \quad \psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1) \Leftrightarrow \text{antisymmetrisch} \Rightarrow$$

$$\text{symmetrische Wellenfunktion} \quad \psi_S = N[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)]$$

$$\text{antisymmetrische Wellenfunktion} \quad \psi_A = N[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)] \Rightarrow$$

Wichtiger Unterschied: bei  $n = m$  ist die antisymmetrische Wellenfunktion für alle Werte von  $x_1$  und  $x_2$  gleich null, die symmetrische Wellenfunktion nicht  $\Rightarrow$

ist die Wellenfunktion, die zwei gleiche Teilchen beschreibt, antisymmetrisch  $\Rightarrow$  dann können die Quantenzahlen  $n$  und  $m$  der beiden Teilchen nicht gleich sein  $\Leftrightarrow$  Pauli'sches Ausschließungsprinzip (Pauli-Verbot):

No two electrons in an atom can have the same quantum numbers.

PAULI EXCLUSION PRINCIPLE

Elektronen, Protonen, Neutronen und einige andere Teilchen haben antisymmetrische Wellenfunktionen  $\Rightarrow$  unterliegen dem Pauli-Verbot  $\Leftrightarrow$  Fermionen.

Alphateilchen, Deuteronen, Photonen, Mesonen haben symmetrische Wellenfunktionen  $\Rightarrow$  unterliegen nicht dem Pauli-Verbot  $\Leftrightarrow$  Bosonen.

**37. Quantenmechanik: Anwendungen**

37.1 Einführung

37.2 Die Schrödinger-Gleichung

37.3 Freie Teilchen

37.4 Die Potentialmauer

37.5 Der Potentialkasten

37.6 Der Potentialtopf

37.7 Teilchen in einem allgemeinen Potential

37.8 Der einfache harmonische Oszillator

37.9 Durchdringung einer Potentialbarriere