

Teil 2:  
Quantitativer Aufbaukurs

# Kapitel 8

## Der Weg zur Schrödinger-Gleichung

### 8.1 Mathematische Beschreibung von Quantenobjekten

Die allgemeinen Ziele der Physik lassen sich in zwei Kategorien einteilen: Zum einen möchte man Einsicht in die grundlegenden Wirkungszusammenhänge der Naturphänomene gewinnen. Dies ermöglicht ein **qualitatives Verständnis** der betrachteten physikalischen Phänomene. Ein Beispiel dafür ist eine der grundlegenden Erkenntnisse der klassischen Mechanik: die Tatsache, dass die gleiche Grundkraft, die Gravitation, für das Herabfallen eines losgelassenen Steins wie auch für die Bewegung des Mondes um die Erde verantwortlich ist. Bei der zweiten Kategorie handelt es sich um die **quantitative Beschreibung** der physikalischen Phänomene. Die Newtonsche Gleichung erlaubt es, die Bahnkurve für den geworfenen Stein und die Mondbewegung abzuleiten und aus den Anfangsbedingungen detaillierte Voraussagen über das zukünftige Verhalten der Objekte zu treffen.

In den vorangegangenen Kapiteln wurden zahlreiche Einblicke in die Grundstrukturen der Quantenphysik gewonnen. Es wurden Beispiele betrachtet, in denen Quantenobjekte in einen bestimmten **Zustand** gebracht wurden. Dies geschah, indem man mit Hilfe einer geeigneten Apparatur eine **Präparation** durchführte. Die Präparation diente dazu, bestimmte dynamische Eigenschaften wie Ort, Impuls oder Polarisation herzustellen. Es zeigte sich aber auch, dass es nicht immer möglich ist, Quantenobjekten eine bestimmte, klassisch wohldefinierte Eigenschaft zuzuschreiben. Die Besonderheiten des quantenmechanischen Messprozesses wurden untersucht, und es wurde die Notwendigkeit einer statistischen Beschreibung von Quantenobjekten gezeigt.

All dies fällt in den Bereich der oben angesprochenen ersten Kategorie: ein qualitatives Verständnis der physikalischen Grundzusammenhänge zu gewinnen. Dies ist im Bereich der Quantenphysik besonders wichtig, da das Verhalten von Quantenobjekten drastisch von dem abweicht, was man im Licht der Vorerfahrungen aus der klassischen Physik für selbstverständlich ansieht.

Im folgenden geht es nun darum, einen Einblick in die quantitative Beschreibung von Quantenobjekten zu gewinnen. Es soll eine erste Einführung in den formalen Apparat der Quantenmechanik gegeben werden, an der man sieht, wie es „funktioniert“, das befremdliche Verhalten von Quantenobjekten mathematisch zu erfassen. Selbst wenn die Ergebnisse von Experimenten mit Elektronen oder Atomen schwer mit unserer Vorstellung zu vereinbaren sind oder gar widersprüchlich erscheinen: Die Quantenmechanik ist in der Lage, sie mathematisch abzuleiten. Alle bisher zu ihrer Prüfung durchgeführten experimentellen Tests hat sie bestanden.

Die Möglichkeit, Quantenobjekte mathematisch zu erfassen, obwohl ihr Verhalten anschaulich nicht verständlich erscheint, haben wir uns schon einmal zunutze gemacht: Beim Doppelspalt-Experiment (Abschnitt 5.5) wurden die Elektronen durch die **Wellenfunktion**  $\psi(x, t)$  beschrieben. Sie ist eine Funktion

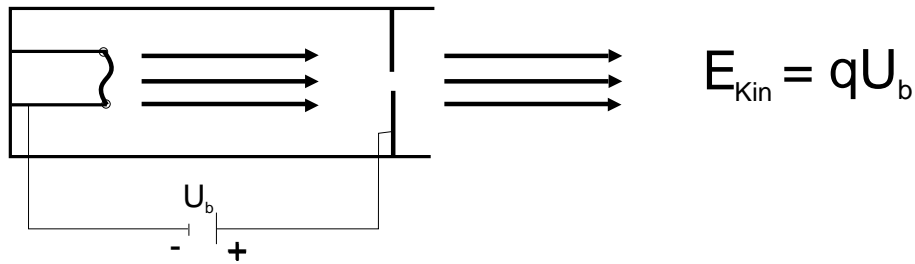


Abbildung 8.1: Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie“ durch eine Beschleunigungsspannung

des Ortes und der Zeit, die sich wellenmäßig ausbreitet. Beim Doppelspaltexperiment konnte das Auftreten von Interferenzerscheinungen dadurch verstanden werden, dass sich die von den beiden Spalten ausgehenden Wellen überlagern, ganz ähnlich wie es bei Wasserwellen der Fall ist. Auf der anderen Seite wurde der teilchenhafte Nachweis der Elektronen auf dem Schirm durch die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion erklärt: Ihr Betragsquadrat  $P(x) = |\psi(x, t)|^2$  beschreibt die **Wahrscheinlichkeit**, ein Elektron zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  auf dem Schirm nachzuweisen. Der scheinbare Widerspruch von Wellen- und Teilchencharakter der Elektronen konnte durch die theoretische Beschreibung vollkommen aufgeklärt werden.

Mit der Wellenfunktion haben wir eines der zentralen Elemente zur mathematischen Erfassung von Quantenobjekten kennengelernt. Die Wellenfunktion beinhaltet die vollständige Information, die nach der Quantenmechanik über ein Quantenobjekt zu erlangen ist. Wie man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Quantenobjekt aus der Wellenfunktion berechnet, ist schon bekannt. In den folgenden Abschnitten wird sich zeigen, wie man aus ihr Aufschluss über andere physikalische Größen gewinnt und wie man sie in einfachen Fällen im Rahmen der Quantenmechanik bestimmen kann. Dabei werden wir uns auf Beispiele beschränken, die mit reellwertigen Funktionen beschrieben werden können.

Zunächst soll jedoch an einem Beispiel gezeigt werden, wie die mathematische Beschreibung von Quantenobjekten durch eine Wellenfunktion konkret aussieht. Dazu wird das einfachste Beispiel ausgewählt, nämlich ein Ensemble von Elektronen, die durch ein Präparationsverfahren in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie gebracht wurden.

## 8.2 Präparation von Elektronen auf bestimmte kinetische Energie

Eine Möglichkeit, Elektronen in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie zu bringen, bietet das folgende Verfahren:

**Experiment 8.1:** Eine Kathodenstrahlröhre wird ohne angelegte Anodenspannung betrieben. Um die Kathode erscheint ein bläuliches Glimmen. Zwischen Kathode und Anode fließt kein Strom. Nach Anlegen der Beschleunigungsspannung  $U_b$  zwischen Kathode und Anode sieht man einen geradlinigen Elektronenstrahl. Es fließt ein elektrischer Strom.

Die Elektronen werden durch die anliegende Spannung  $U_b$  beschleunigt (Abb. 8.1). Der erste Teil des Versuchs zeigt, dass die Elektronen ohne die anliegende Beschleunigungsspannung keine nennenswerte kinetische Energie besitzen. Nach dem Durchlaufen der Beschleunigungsstrecke besitzen die Elektronen die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = qU_b$ . Innerhalb geringer Fehlergrenzen haben alle Elektronen, die diese Präparationsvorrichtung durchlaufen, dieselbe kinetische Energie. Sie bilden daher ein Ensemble von Elektronen, das auf kinetische Energie präpariert ist. Jedes einzelne Elektron, das zu diesem Ensemble gehört, besitzt die **Eigenschaft** „kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = qU$ “.

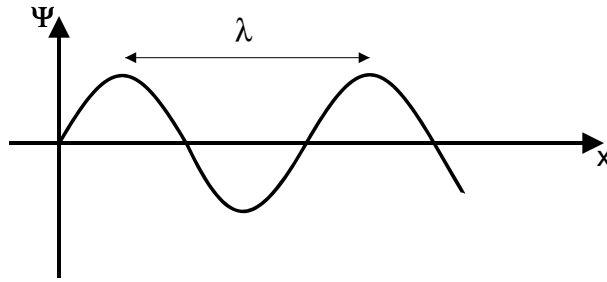


Abbildung 8.2: Momentaufnahme einer Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$ .

### 8.3 Wellenfunktion eines freien Elektrons

Mit dem obigen Präparationsverfahren können wir ein Ensemble von Elektronen mit bestimmter kinetischer Energie präparieren. Wie kann man diese Elektronen mathematisch beschreiben? Wie sieht die Wellenfunktion aus, die ihnen zugeordnet ist? Die aus anderen Bereichen der Physik bekannten Wellen (z. B. Seilwellen oder Lichtwellen) sind harmonische Wellen (räumlich fortlaufende Sinus- und Cosinusfunktionen). Es ist naheliegend, die Wellenfunktion der Elektronen versuchsweise ebenso anzusetzen:

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}\right) + B \cos\left(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}\right). \quad (8.1)$$

Dabei sind  $A$  und  $B$  konstante Faktoren. Der von  $t$  abhängige Term gibt die Zeitabhängigkeit der Welle an einem bestimmten Ort wieder. Abb. 8.2 zeigt die Momentaufnahme der Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$ .

In Gleichung (8.1) taucht das typische Kennzeichen einer Welle, die Wellenlänge  $\lambda$  auf. Bereits in Abschnitt 5.3 haben wir das Wellenverhalten von Elektronen quantitativ erfasst und ihnen eine Welle, die **de-Broglie-Wellenlänge**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} \quad (8.2)$$

zugeordnet. Wir greifen nun auf dieses Ergebnis zurück und setzen diesen Ausdruck in die Formel (8.1) ein. Die Bedeutung von  $\lambda$  wird nun klar: Es ist die Wellenlänge der den Elektronen zugeordneten *Wellenfunktion*.

Mit der Abkürzung  $\hbar = h/2\pi$  erhalten wir:

**Die Wellenfunktion, die einem auf kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  präparierten Ensemble von Quantenobjekten zugeordnet ist, lautet:**

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right). \quad (8.3)$$

### 8.4 Operatoren für physikalische Größen

Im vorausgegangenen Abschnitt wurde untersucht, wie Quantenobjekte mathematisch zu beschreiben sind. Die Vorgehensweise orientierte sich dabei an dem in Experimenten üblichen Verfahren: Um ein

Experiment an Quantenobjekten durchführen zu können, muss man sie erst in den gewünschten Zustand bringen, d. h. eine *Präparation* durchführen. In unserem Fall wurden Elektronen mit einer Beschleunigungsspannung so präpariert, dass sie die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen.

Diesem experimentellen „Herstellen“ eines bestimmten Zustands durch Präparation entspricht auf der theoretischen Seite die Angabe einer **Wellenfunktion**. Dies ist in Abb. 8.3 symbolisiert. Mit der Wellenfunktion kann man ein durch Präparation hergestelltes Ensemble von Quantenobjekten **charakterisieren**. Den Elektronen, die mit einer Beschleunigungsspannung in einen Zustand mit der Eigenschaft „kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$ “ gebracht wurden, ist zur Beschreibung die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  (Gleichung (8.3)) zugeordnet.

Umgekehrt kann man die folgende experimentelle Situation betrachten: Man hat ein auf kinetische Energie präpariertes Ensemble von Elektronen vorliegen und möchte den Wert der kinetischen Energie erschließen. Im Experiment geschieht dies durch eine **Messung**. Die Elektronen treffen auf ein Messgerät, dieses zeigt nach der Messung den Wert der kinetischen Energie an (Abb. 8.4 (a)).

Gleichermaßen sollte man auch aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ermitteln können, welchen Wert der kinetischen Energie das zugehörige Ensemble besitzt. Es sollte also möglich sein, wie in Abb. 8.4 (b) dargestellt, mit Hilfe einer mathematischen Operation aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  den Wert von  $E_{\text{kin}}$  zu erhalten. Dies leisten in der Quantenmechanik die **Operatoren**.

### Mathematischer Einschub: Operatoren

Ein Operator ist die Anweisung, eine bestimmte mathematische Operation an der Wellenfunktion  $\psi$  durchzuführen. Dabei kann es sich um so einfache Operationen wie die Multiplikation mit einer Konstanten oder einer Funktion handeln oder um eine eher komplizierte Operation wie die Differentiation.

Man symbolisiert die Anwendung eines Operators  $\hat{A}$  auf die Wellenfunktion  $\psi$  durch die Schreibweise  $\hat{A}\psi$ . Das „Dach“ über dem  $A$  soll dabei deutlich machen, dass es sich um einen Operator handelt. Ist  $\hat{A}$  der Operator „Multiplikation mit der Konstanten  $c$ “, so bedeutet  $\hat{A}\psi$  die Anweisung „multipliziere  $\psi$  mit der Konstanten  $c$ “:

$$\hat{A}\psi \quad \text{steht für} \quad c \cdot \psi. \quad (8.4)$$

Wenn  $\hat{B}$  der Operator „Differentiation nach  $x$ “ ist, heißt  $\hat{B}\psi$  „differenziere die Wellenfunktion  $\psi$  nach  $x$ “:

$$\hat{B}\psi(x) \quad \text{steht für} \quad \psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.5)$$

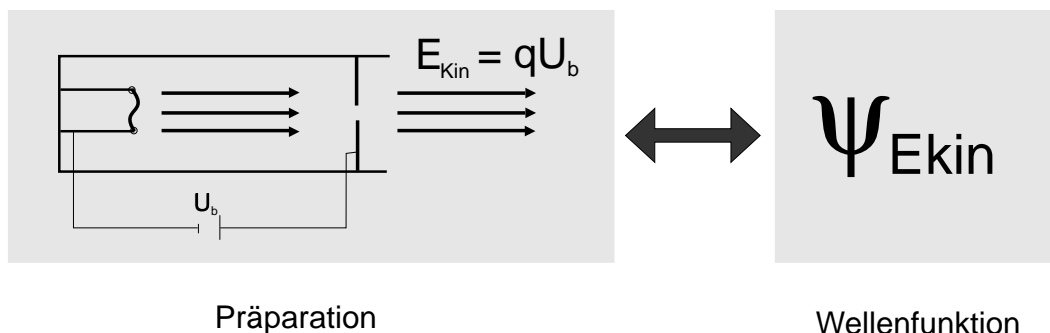


Abbildung 8.3: Präparation und Wellenfunktion

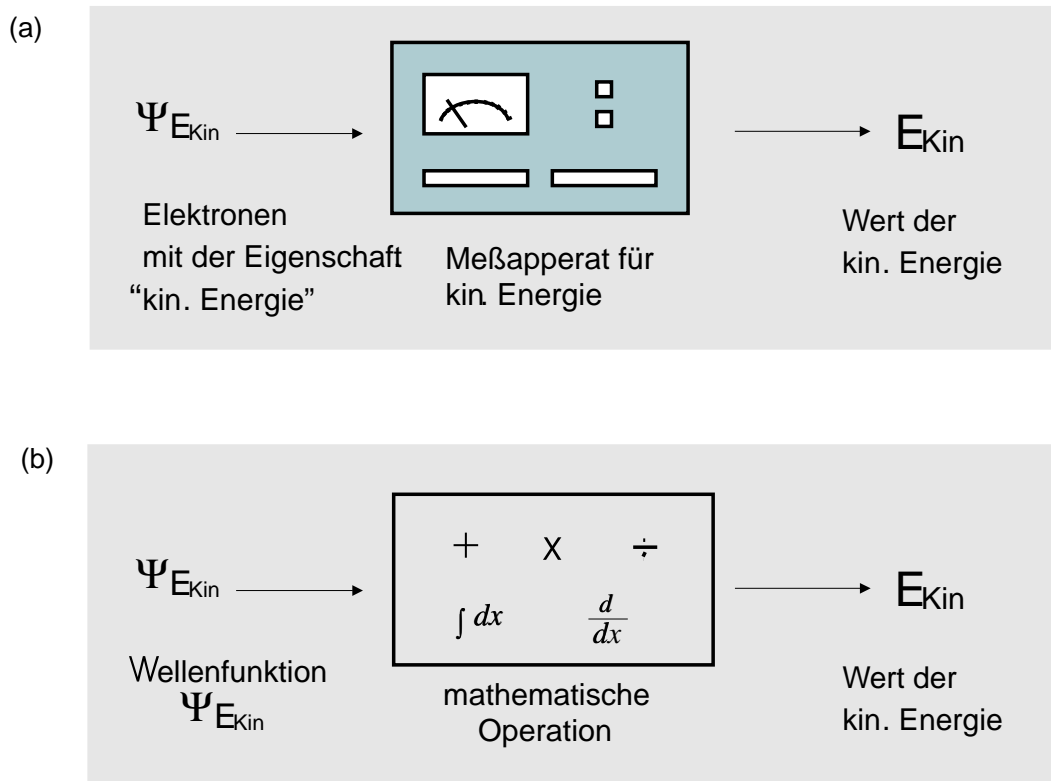


Abbildung 8.4: Analogie zwischen Messung und Anwendung eines Operators

Man kann auch kurz schreiben

$$\hat{B} = \frac{d}{dx} \quad (8.6)$$

und meint damit, dass  $\hat{B}$ , angewandt auf eine beliebigen Wellenfunktion, die Anweisung zur Differentiation nach  $x$  bedeutet.

## 8.5 Der Operator der kinetischen Energie

Mit dem Konzept des Operators ist es möglich, die eingangs gestellte Frage zu bearbeiten: Wie kann man aus der Wellenfunktion für auf kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  präparierte Elektronen

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) + B \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right). \quad (8.7)$$

den Wert der kinetischen Energie gewinnen? Gesucht ist ein Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$ , der nach Anwendung auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  den Wert  $E_{\text{kin}}$  liefert. Wie könnte dies konkret aussehen?

Direktes Auflösen von (8.7) nach  $E_{\text{kin}}$  funktioniert nicht, denn  $E_{\text{kin}}$  steht im Argument der Sinus- bzw. Kosinusfunktion. Selbst wenn eine der Konstanten  $A$  oder  $B$  Null wäre und man die inversen Winkelfunktionen anwenden könnte, würde dies zu einer mathematisch höchst verwickelten Rechenvorschrift führen. Dies widerspräche dem physikalischen *Einfachheitsprinzip*: Grundlegende physikalische Größen wie die kinetische Energie sollten durch *einfache* mathematische Operationen dargestellt werden.

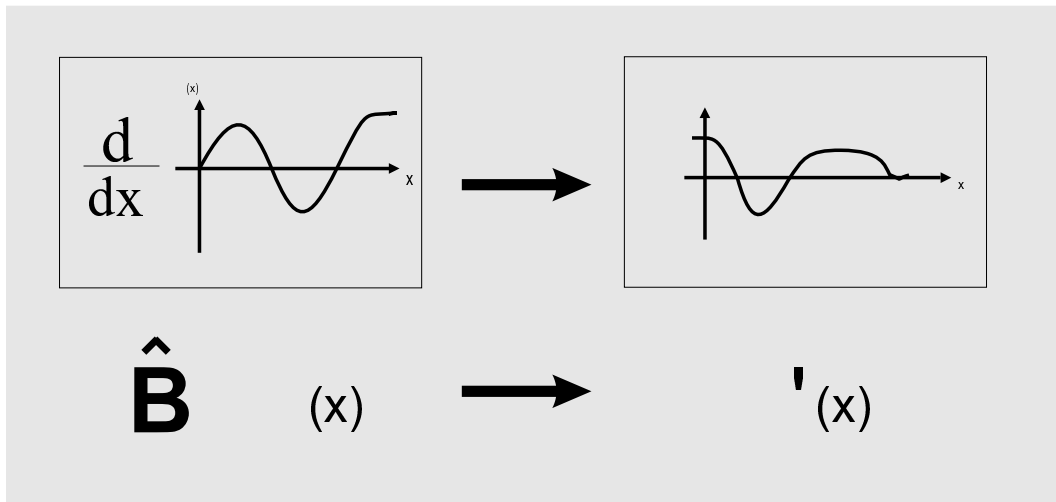


Abbildung 8.5: Veranschaulichung der Wirkung eines Operators am Beispiel der Differentiation

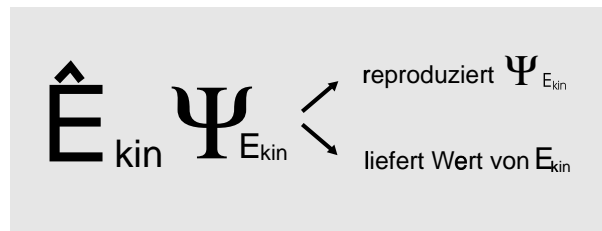


Abbildung 8.6: Wirkung des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$ .

Das direkte Auflösen nach  $E_{\text{kin}}$  führt also nicht zum Ziel. Anscheinend muss der Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  den Wert der kinetischen Energie auf andere Weise liefern. Die folgende Überlegung kann uns weiterhelfen: Zunächst halten wir fest, dass die Anwendung eines Operators auf eine Wellenfunktion wieder eine Wellenfunktion ergibt. Zum Beispiel ergibt die Anwendung des Operators  $\hat{B} = \frac{d}{dx}$  auf die Funktion  $\psi(x) = A \sin(x)$  eine neue Funktion  $A \cos(x)$ . Dies ist in Abb. 8.5 symbolisiert.

Was könnte die Wellenfunktion sein, die sich durch Anwenden des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ergibt? Die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  repräsentiert ein Ensemble von Elektronen, das die Eigenschaft „kinetische Energie“ *besitzt*. Die plausibelste Annahme ist, dass der Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  diese Wellenfunktion weitgehend unverändert lässt. (Als Analogie denke man an den Newtonschen Prismenversuch in Kapitel 2 zurück (Abb. 2.3): Das mit Prisma und Blende auf die Eigenschaft „Wellenlänge“ präparierte Licht wurde in einem zweiten Prisma nicht weiter aufgefächert: Es blieb unverändert.) Da die Wellenfunktion (8.7) nur bis auf konstante Faktoren festgelegt ist, ist dies dann der Fall, wenn  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{E_{\text{kin}}}$  sich von  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  höchstens um einen konstanten Vorfaktor unterscheidet, also *proportional* zu  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ist:

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{E_{\text{kin}}} \sim \psi_{E_{\text{kin}}} \quad (8.8)$$

Wir stellen also an den Operator der kinetischen Energie zwei Forderungen (Abb. 8.6):

- Die Anwendung des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  soll diese bis auf konstante Faktoren reproduzieren.
- Es soll dabei die Information über den Wert der kinetischen Energie geliefert werden.

Eine mathematische Operation, welche die Sinus- und Kosinusfunktionen in der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  reproduziert, ist die *Ableitung*. Differentiation von  $\sin(x)$  führt zum Kosinus, nochmalige Ableitung wieder zurück zu  $-\sin(x)$ . So ergibt sich z. B. für den ersten Term aus (8.7) nach einmaliger Ableitung:

$$\frac{d}{dx} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right] = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right]. \quad (8.9)$$

Nochmalige Ableitung liefert:

$$\frac{d^2}{dx^2} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right] = -\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right]. \quad (8.10)$$

Für den Kosinus-Term in (8.7) gilt eine entsprechende Gleichung, so dass die Wellenfunktion nach zweimaliger Differentiation in der Tat bis auf einen Faktor reproduziert wird:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_{\text{kin}}}(x) = -\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}}(x). \quad (8.11)$$

Damit ist die erste der beiden Forderungen erfüllt. Multiplizieren wir beide Seiten der Gleichung (8.11) mit  $-\hbar^2/(2m)$ , ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_{\text{kin}}}(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}}(x). \quad (8.12)$$

Der Operator, der auf der linken Seite dieser Gleichung auf die Wellenfunktion wirkt, erfüllt beide Forderungen, die wir an den Operator der kinetischen Energie gestellt haben. Er reproduziert nicht nur die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$ , sondern gibt auch den Wert der kinetischen Energie an:  $E_{\text{kin}}$  ist gerade der Proportionalitätsfaktor auf der rechten Seite. Wir schließen also:

**Der Operator der kinetischen Energie ist**

$$\hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (8.13)$$

**Wendet man ihn auf eine Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  an, die eine Ensemble von Quantenobjekten mit bestimmter kinetischer Energie beschreibt, wird die Wellenfunktion reproduziert; der Proportionalitätsfaktor gibt den Wert der kinetischen Energie wieder:**

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi_{E_{\text{kin}}} = E_{\text{kin}} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}} \quad (8.14)$$

In der letzten Gleichung ist zu beachten, dass  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf der linken Seite ein *Operator* ist (d. h. eine Anweisung, eine mathematische Operation an einer Wellenfunktion durchzuführen),  $E_{\text{kin}}$  auf der rechten Seite dagegen eine *Zahl*, die den Wert der kinetischen Energie angibt, den wir bei Messungen an den Elektronen dieses Ensembles finden.



## 8.6 Eigenwertgleichung

Mit dem Operator der kinetischen Energie haben wir ein systematisches Verfahren gefunden, den Wert der kinetischen Energie aus einer Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  zu ermitteln. Wenn das die einzige Aufgabe wäre, zu der man den Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  benutzen könnte, wäre der Aufwand im Verhältnis zum Nutzen recht hoch. Aber Operatoren für physikalische Größen haben in der Quantenmechanik noch andere Aufgaben. Sie erlauben es, auf die Frage zurückzukommen, *ob und wann man Quantenobjekten eine bestimmte dynamische Eigenschaft zuschreiben kann*. Diese Frage hatte sich bei den Experimenten mit einzelnen Photonen in Kapitel 2 und den Doppelspaltexperimenten in Kapitel 5 als eines der zentralen Elemente erwiesen, das die Quantenmechanik von der klassischen Physik unterscheidet. Mit der Benutzung von Operatoren, die auf Wellenfunktionen angewendet werden können, lässt sich dieses Problem nun auch auf der theoretischen Ebene angehen.

Im letzten Abschnitt wurde der Operator der kinetischen Energie nur auf Wellenfunktionen von Quantenobjekten angewendet, die die Eigenschaft „kinetische Energie“ wirklich *besitzen* (also auf kinetische Energie präpariert wurden). Es gibt auch Quantenobjekte, die diese Eigenschaft *nicht besitzen*. Was passiert, wenn man  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  anwendet, die solche Quantenobjekte beschreibt?

**Beispiel (Gaußsche Wellenfunktion):** Betrachten wir die Wellenfunktion

$$\psi_{\text{Gauß}}(x) \sim e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (8.15)$$

die ein Ensemble von Quantenobjekten beschreibt, das die Eigenschaft kinetische Energie nicht besitzt. Sie hat die Form einer Gaußschen Glockenkurve. Nach Gleichung (5.12) gibt  $|\psi(x)|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Quantenobjekt am Ort  $x$  nachzuweisen.  $\psi_{\text{Gauß}}(x)$  beschreibt also eine um den Ort  $x_0$  zentrierte Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Breite  $\sigma$ .

Wendet man  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf diese Wellenfunktion an, ergibt sich

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{\text{Gauß}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{(x-x_0)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (8.16)$$

Dies kann *nicht* in der Form  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{\text{Gauß}}(x) = \text{Konstante} \cdot \psi_{\text{Gauß}}(x)$  geschrieben werden.

In den beiden bisher betrachteten Beispielen hat sich gezeigt: Eine Wellenfunktion, die Quantenobjekten mit der Eigenschaft „kinetische Energie“ entspricht, wird bei Anwendung des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  reproduziert. Für eine Wellenfunktion, die Quantenobjekte ohne diese Eigenschaft beschreibt, ist das nicht der Fall. Dies gilt nicht nur für diese beiden speziellen Beispiele, sondern ist eine allgemeine Tatsache:

Wenn  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  angewandt wird und das Ergebnis *nicht* proportional zu  $\psi(x)$  selbst ist, besitzen die durch  $\psi(x)$  beschriebenen Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“ *nicht*. Misst man an einem Ensemble solcher Quantenobjekte die kinetische Energie, erhält man keinen einheitlichen Messwert, sondern die Messwerte streuen (vgl. Abschnitt 7.3).

Wenn dagegen  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi(x)$  proportional zu  $\psi(x)$  ist, *besitzen* die Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“. Man sagt in diesem Fall, dass die **Eigenwertgleichung**  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x)$  erfüllt ist. Die Zahl  $E_{\text{kin}}$ , die den Wert der kinetischen Energie angibt, nennt man den **Eigenwert** der kinetischen Energie. Bei einer Messung der kinetischen Energie wird dieser Wert in jedem Fall gefunden. Die Messwerte streuen innerhalb des durch  $\psi(x)$  beschriebenen Ensembles nicht.

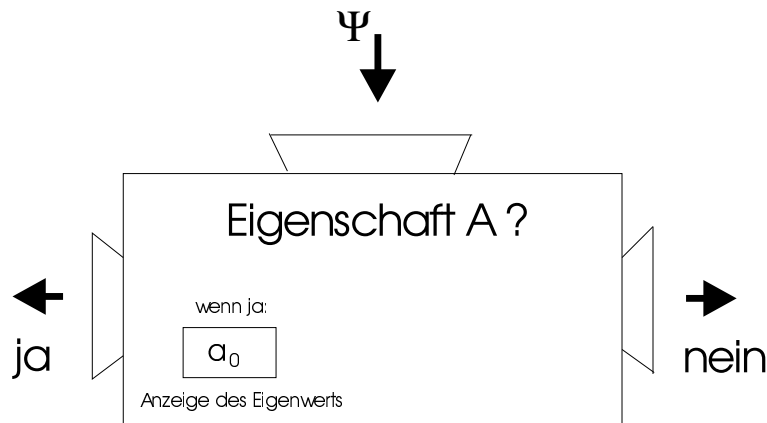


Abbildung 8.7: Eigenwertgleichung als Maschine

Mit dem Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  kann man die Frage beantworten: *Besitzen die Quantenobjekte, die von einer bestimmten Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben werden, die Eigenschaft „kinetische Energie“ oder nicht?*

- ▷ Wenn die Wellenfunktion die Eigenwertgleichung

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x) \quad (8.17)$$

erfüllt, besitzen die Quantenobjekte tatsächlich die Eigenschaft „kinetische Energie“. Der Wert der kinetischen Energie, den man den Quantenobjekten in diesem Fall zuschreiben kann, wird durch den Proportionalitätsfaktor  $E_{\text{kin}}$  (den Eigenwert der kinetischen Energie) angegeben.

- ▷ Ist die Eigenwertgleichung *nicht* erfüllt, besitzen die durch  $\psi(x)$  beschriebenen Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“ *nicht*.

Natürlich gilt dies nicht nur für die Eigenschaft „kinetische Energie“, sondern auch für alle anderen dynamischen Eigenschaften (z. B. Impuls). Zu jeder dynamischen Eigenschaft  $A$  gehört ein Operator  $\hat{A}$ . Man kann entscheiden, ob Quantenobjekte, die durch eine Wellenfunktion  $\psi$  beschrieben werden, die Eigenschaft  $A$  besitzen, indem man die zugehörige Eigenwertgleichung  $\hat{A}\psi = a_0\psi$  betrachtet.

Man kann die Eigenwertgleichung anschaulich als eine Art „Maschine“ auffassen (Abb. 8.7). Wenn man eine Wellenfunktion  $\psi$  in die Maschine „füttert“, zeigt sie an, ob Quantenobjekte im Zustand  $\psi$  die Eigenschaft  $A$  besitzen oder nicht. Dazu wird getestet, ob  $\hat{A}\psi$  proportional zu  $\psi$  ist. Lautet die Antwort „ja“, zeigt die Maschine zusätzlich den Wert von  $A$  an (die Proportionalitätskonstante  $a_0$ ).

## 8.7 Operator der Gesamtenergie

Mit der Eigenwertgleichung haben wir eine systematische Methode gefunden, um herauszufinden, ob Quantenobjekte eine bestimmte dynamische Eigenschaft besitzen oder nicht. Bisher konnten wir sie nur für einen Operator – den der kinetischen Energie – anwenden.

Eine dynamische Eigenschaft, die in der Quantenmechanik eine besonders große Rolle spielt, ist die **Gesamtenergie**. In der klassischen Physik ist die Gesamtenergie  $E_{\text{ges}}$  die Summe aus kinetischer Energie  $E_{\text{kin}}$  und potentieller Energie  $V$ . Die Frage ist: Wie sieht der quantenmechanische Operator für die Gesamtenergie aus? Im Fall der kinetischen Energie enthielt der Operator die Anweisung zur zweimaligen Differentiation. Gilt für die potentielle Energie etwas Ähnliches? Welche Form besitzt der entsprechende Operator?

Um auf die Gesamtenergie zu kommen, reicht es nicht mehr aus, wie bisher freie Elektronen zu betrachten. Wir müssen Elektronen in einem **Potential** untersuchen. Dazu betrachten wir einen möglichst einfachen Fall: Elektronen bewegen sich in einem konstanten Potential und werden auf einer kurzen Strecke beschleunigt. Anschließend ist das Potential wieder konstant (Abb. 8.8).

**Experiment 9.1 (Gedankenexperiment):** Wir betrachten Elektronen, die auf feste kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^{(I)}$  präpariert worden sind (indem sie z. B. eine Beschleunigungsspannung durchlaufen haben, vgl. Abschnitt 8.2). In der Region I in Abb. 8.8 besitzen sie diese Eigenschaft. Der Elektronenstrahl durchläuft nun eine *weitere* Beschleunigungsspannung  $U$  (Region II in Abb. 8.8), so dass die Elektronen anschließend in Region III eine andere kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^{(III)}$  besitzen.

Der Potentialverlauf ist in Abb. 8.9 dargestellt. In den Regionen I und III hat das Potential einen konstanten Wert, denn es wirkt keine Beschleunigungsspannung. Insgesamt gilt:

- **Region I:** Das Potential hat den konstanten Wert  $V(x) = 0$ . Die Elektronen besitzen die Eigenschaft „kinetische Energie“. Ihr Wert ist  $E_{\text{kin}}^{(I)}$ .
- **Region II:** Die Elektronen werden durch die angelegte Spannung beschleunigt. Über ihre Eigenschaften lässt sich keine Aussage machen.
- **Region III:** Das Potential hat den konstanten Wert  $V(x) = V_0$  mit  $V_0 < 0$ . Da die Beschleunigung durch eine Spannung ein Verfahren zur Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie“ darstellt, besitzen die auslaufenden Elektronen in Region III diese Eigenschaft. Ihr Wert ist  $E_{\text{kin}}^{(III)}$ .

Mit Hilfe dieser Beziehungen können wir uns die Wellenfunktion von Quantenobjekten in einem konstanten Potential (also in der Region III) erschließen. Wir nutzen dazu aus, dass die Elektronen sowohl in der Region I als auch in der Region III die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen. Die Wellen-

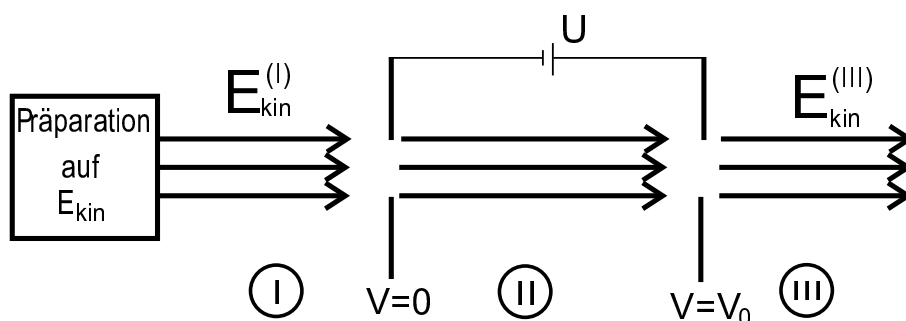


Abbildung 8.8: Auf kinetische Energie präparierte Elektronen durchlaufen nochmals eine Beschleunigungsspannung

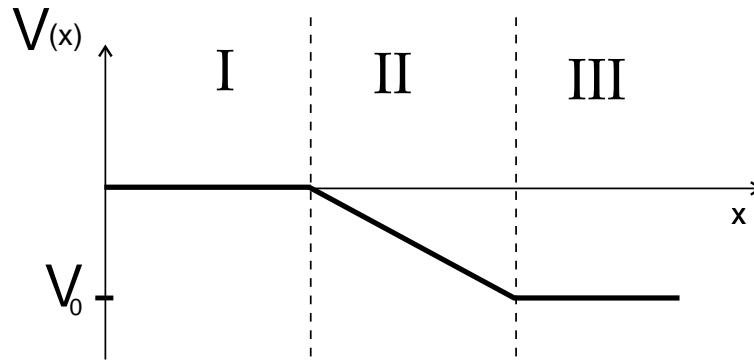


Abbildung 8.9: Potentialverlauf in den Regionen I – III.

funktion für Elektronen mit dieser Eigenschaft ist aber nach Gleichung (8.7) bekannt. In Region III gilt demnach:

$$\psi^{(\text{III})}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}^{(\text{III})}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(\text{III})}} \right) + \dots \quad (8.18)$$

(der Einfachheit halber betrachten wir nur den ersten Term von Gleichung (8.7); für den zweiten Term verläuft die Rechnung analog).

Nun können wir die *kinetische Energie*  $E_{\text{kin}}^{(\text{III})}$  in dieser Gleichung durch die *Gesamtenergie* ausdrücken. Denn wie in der klassischen Physik gilt nach dem Energieerhaltungssatz:

$$E_{\text{ges}} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(\text{I})} + 0}_{\text{Gesamtenergie in der Region I; } V(x)=0} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(\text{III})} + V_0}_{\text{Gesamtenergie in der Region III}} \quad (8.19)$$

Für die kinetische Energie in Region III gilt also:

$$E_{\text{kin}}^{(\text{III})} = E_{\text{ges}} - V_0 \quad (8.20)$$

Wir können dies in die Wellenfunktion  $\psi^{(\text{III})}$  einsetzen und erhalten als Ergebnis für die **Wellenfunktion für ein Ensemble von Elektronen im konstanten Potential  $V_0$** :

$$\psi^{(\text{III})}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(\text{III})}} \right) + \dots \quad (8.21)$$

Mit diesem Resultat können wir zur nächsten Frage kommen: Was ist der **Operator der Gesamtenergie**? Gesucht ist ein Operator, der bei Anwendung auf die Wellenfunktion (8.21) den Wert der Gesamtenergie liefert. Er soll die Gleichung

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi^{(\text{III})} = E_{\text{ges}} \cdot \psi^{(\text{III})} \quad (8.22)$$

erfüllen. Um den Operator der kinetischen Energie zu finden, haben wir die Wellenfunktion zweimal differenziert. Versuchen wir mit  $\psi^{(\text{III})}$  das gleiche, ergibt sich:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi^{(\text{III})} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi^{(\text{III})}. \quad (8.23)$$

Multiplikation mit  $-\hbar^2/(2m)$  liefert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi^{(III)} = (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi^{(III)}. \quad (8.24)$$

Bringt man nun noch den Term  $V_0 \cdot \psi^{(III)}$  auf die linke Seite, hat die Gleichung die gewünschte Form:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi^{(III)} = E_{\text{ges}} \cdot \psi^{(III)}. \quad (8.25)$$

Wir können an dieser Gleichung durch Vergleich mit (8.22) den Operator der Gesamtenergie ablesen. Es ist der in eckigen Klammern stehende Ausdruck. In unserem Beispiel handelte es sich um ein räumlich konstantes Potential:  $V(x) = V_0 = \text{const}$  für  $x$  in der Region III. Das Ergebnis gilt aber auch für allgemeinere Potentiale, wenn man  $V_0$  durch  $V(x)$  ersetzt.

**Der Operator der Gesamtenergie ist**

$$\hat{E}_{\text{ges}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (8.26)$$

**Er setzt sich aus dem Operator der kinetischen Energie und dem Operator der potentiellen Energie zusammen:  $\hat{E}_{\text{ges}} = \hat{E}_{\text{kin}} + \hat{E}_{\text{pot}}$ . Dabei entspricht der Operator  $\hat{E}_{\text{pot}}$  einfach der Multiplikation der Wellenfunktion mit  $V(x)$ .**

## 8.8 Die Grundgleichung der Quantenmechanik

Zustände, in denen die Antreffwahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$  sich zeitlich nicht verändert, spielen eine besonders große Rolle in der Quantenmechanik. Beispiele dafür sind der gleichmäßige Fluss von Elektronen in einem Kathodenstrahl und die Zustände, die Elektronen in Atomen einnehmen. Man nennt solche Zustände mit einer zeitunabhängigen Antreffwahrscheinlichkeit **stationäre Zustände**.

Quantenobjekte in stationären Zuständen tauschen wegen ihrer Zeitunabhängigkeit keine Energie mit ihrer Umgebung aus. Sie besitzen also einen zeitlich konstanten Wert der Energie (d. h. sie besitzen die **Eigenschaft „Gesamtenergie“**). Der Grund, warum dieser Eigenschaft eine so große Bedeutung in der Quantenmechanik zukommt, ist: Um die stationären Zustände von Quantenobjekten zu finden, muss man Zustände mit der Eigenschaft „Gesamtenergie“ suchen.

Wie findet man Zustände mit einer bestimmten Gesamtenergie? In Abschnitt 8.6 wurde schon ein Verfahren gefunden, mit dem man entscheiden kann, ob eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  Quantenobjekte mit einer bestimmten Eigenschaft beschreibt: Man betrachtet die Eigenwertgleichung für diese Eigenschaft. Deshalb muss man, um stationäre Zustände zu finden, die **Eigenwertgleichung der Gesamtenergie** betrachten:

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (8.27)$$

oder, wenn man  $\hat{E}_{\text{ges}}$  ausschreibt:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x) \quad (8.28)$$

Die Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie ist eine der wichtigsten Gleichungen in der Quantenmechanik. Sie heißt **Schrödinger-Gleichung**.

Ein Zustand mit zeitunabhängiger Antreffwahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$  heißt *stationärer Zustand*. Quantenobjekte in stationären Zuständen besitzen die Eigenschaft „Gesamtenergie“. Ihre Wellenfunktion  $\psi(x)$  erfüllt die *Schrödinger-Gleichung*, d. h. die Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x). \quad (8.29)$$

Um die physikalischen Zustände z. B. von Elektronen in Atomen zu ermitteln, muss man Wellenfunktionen auffinden, die die Schrödinger-Gleichung erfüllen, wenn das jeweilige Potential  $V(x)$ , das die physikalische Situation beschreibt, vorgegeben ist. Daher ist die Schrödinger-Gleichung die Grundgleichung der Quantenmechanik, vergleichbar mit der Newtonschen Gleichung in der Mechanik.

## 8.9 Das Auffinden stationärer Zustände mit der Schrödinger-Gleichung

Bisher haben wir Eigenwertgleichungen als eine „Maschine“ benutzt, um nachzuprüfen, ob eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  die entsprechende Eigenschaft besitzt (vgl. Abb. 8.7). Statt sich nun verschiedene Wellenfunktionen auszudenken und eine nach der anderen durchzuprobieren, kann man versuchen, die Schrödinger-Gleichung *direkt* zu lösen, um diejenigen Wellenfunktionen zu finden, die Ensembles mit der Eigenschaft „Gesamtenergie“ beschreiben. Dabei geht man folgendermaßen vor:

1. *Analyse der physikalischen Situation*. Der erste Schritt besteht darin, das Potential  $V(x)$  zu finden, das auf die betrachteten Quantenobjekte einwirkt. Als Beispiel betrachten wir das **Wasserstoffatom**: Hier bindet ein lokalisierter Kern genau ein Elektron durch die Coulomb-Kraft an sich. Das Potential, in dem sich das Elektron befindet, ist also das Coulomb-Potential (Abb. 8.10).

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (8.30)$$

2. *Einsetzen des Potentials in die Schrödinger-Gleichung*. Das Potential wird nun in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Man erhält eine Gleichung, die  $\psi(x)$  erfüllen, muss, damit es die Eigenschaft „Gesamtenergie“ besitzt.
3. *Lösen der Schrödinger-Gleichung* In der Schrödinger-Gleichung  $\hat{E}_{\text{ges}} \psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x)$  ist nur der Operator  $\hat{E}_{\text{ges}}$  vorgegeben. Die Wellenfunktion  $\psi(x)$  und auch der Eigenwert  $E_{\text{ges}}$  sind zunächst noch unbekannt. Sie müssen durch *Lösung der Eigenwertgleichung* aufgefunden werden (vgl. Abb. 8.11). Da der Operator der Gesamtenergie die Anweisung zur Differentiation nach  $x$  enthält, handelt es sich bei der Schrödingergleichung um eine **Differentialgleichung**, d. h. um eine Gleichung, in dem neben  $\psi(x)$  noch die Ableitungen  $\psi''(x)$  (und ggf.  $\psi'(x)$ ) vorkommen. Das Lösen einer solchen Gleichung ist oft nicht einfach. Daher muss man sich oft auf vereinfachte Modelle beschränken oder zu Näherungsverfahren greifen.

Das Lösen der Schrödingergleichung für den hier betrachteten Fall des Wasserstoffatoms (d. h. ein Elektron im Coulomb-Potential) ist mit unseren mathematischen Methoden nicht zu bewältigen. Wir müssen

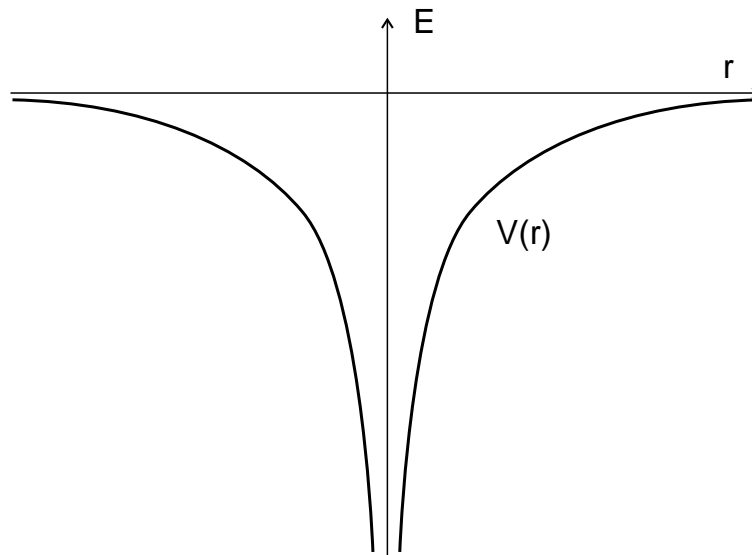


Abbildung 8.10: Coulomb-Potential

Eigenfunktion (gesucht)

$$\hat{E}_{\text{ges}} \Psi_{\text{Eges}} = E_{\text{ges}} \cdot \Psi_{\text{Eges}}$$

↑
↑  
 Operator der Gesamtenergie (bekannt)      Eigenwert gesucht

Abbildung 8.11: Vorgehensweise beim Lösen der Schrödinger-Gleichung

uns daher auf einfachere Systeme beschränken, zu Näherungsverfahren greifen oder numerische Methoden benutzen. Im folgenden Abschnitt wird mit dem unendlich hohen Potentialtopf ein System betrachtet, für das wir die Schrödinger-Gleichung lösen können. Das Wasserstoff-Atom wird in Abschnitt 9.7 behandelt, wo wir ein Näherungsverfahren benutzen.

## 8.10 Elektronen im Potentialtopf

Mit dem Aufstellen der Schrödinger-Gleichung ist man der realistischen Beschreibung von Quantenobjekten ein großes Stück nähergekommen. Unser Interesse richtet sich hauptsächlich auf das Verständnis der Elektronen in Atomen. Diese Elektronen werden durch elektrische Anziehungskräfte (beschrieben durch das Potential des Kerns) in der Umgebung des Atomkerns festgehalten. Quantenobjekte, die durch ein Potential auf einen bestimmten Raumbereich eingeschränkt sind, nennt man **gebunden**.

Quantenobjekte zeigen eine Reihe von neuen, verblüffenden Effekten, wenn sie in einen beschränkten Raumbereich „eingesperrt“ werden. Dazu gehören die **Quantisierung der Energie** und der **Tunneleff-**

**fekt.** Diese Phänomene sollen in den folgenden Abschnitten untersucht werden. Um zunächst ein Gespür für die neuen Effekte zu entwickeln und die Umstände zu verstehen, unter denen sie auftreten, soll zuerst ein einfaches Modell für gebundene Elektronen betrachtet werden. In der Folge können wir dann zu komplizierteren und realistischeren Systemen übergehen.

Als Prototyp für gebundene Systeme, an dem alle wesentlichen Züge schon klar hervortreten, betrachten wir Elektronen, die in einem **Potentialtopf** gebunden sind. Damit bezeichnet man den in Abb. 8.12 gezeigten Potentialverlauf. Ein Elektron ist in einen Raumbereich der Breite  $a$  eingesperrt, aus dem es nicht entkommen kann: Die „Wände“ des Potentialtopfs bilden eine undurchdringliche Barriere; das Potential geht dort gegen Unendlich. Im Innern des Potentialtopfs (d. h. für  $0 \leq x \leq a$ ) sollen dagegen auf die Elektronen keine Kräfte einwirken. Das Potential besitzt hier einen konstanten Wert  $V_0$ .

Dieses Modellpotential ist nicht nur besonders einfach; es beschreibt auch durchaus physikalisch realistische Systeme. Zum Beispiel kann man Elektronen in einem Halbleitermaterial mit „Potentialwänden“ aus Isolatormaterial einsperren. Die modernen Techniken der Halbleiterherstellung erlauben es, Strukturen im Nanometerbereich zu erzeugen. So kann man Elektronen in allen drei Raumdimensionen einsperren („Quantenpunkte“) oder sie auf eine Raumdimension beschränken („Quantendrähte“). Das Modell des Potentialtopfs (das wir hier zunächst in einer einzigen Raumdimension betrachten) beschreibt das „Einsperren“ der Elektronen quantitativ.

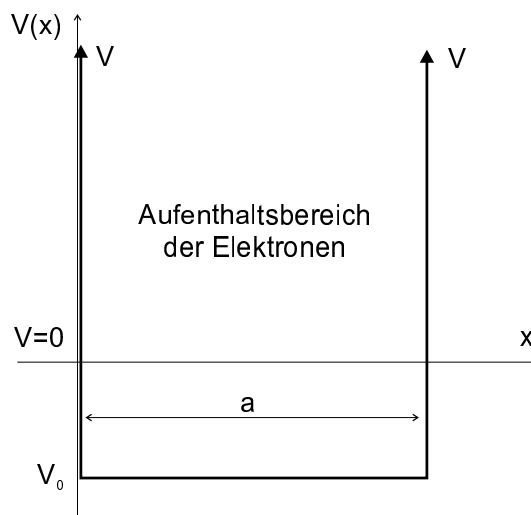


Abbildung 8.12: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Nachdem wir den Potentialverlauf in der betrachteten physikalischen Situation festgelegt haben, können wir unsere ersten Erfahrungen beim Lösen der Schrödinger-Gleichung sammeln. Im Innern des Potentialtopfs lautet die Gleichung (8.28):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (8.31)$$

oder nach Umformung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \psi(x). \quad (8.32)$$

Bei  $E_{\text{ges}}$  und  $V_0$  handelt es sich um Konstanten. Gesucht ist also eine Funktion  $\psi(x)$ , die nach zweimaligem Ableiten bis auf Proportionalitätsfaktoren wieder in sich selbst übergeht. Mit Sinus und Kosinus kennen wir zwei solcher Funktionen. Wir versuchen es also mit dem *Ansatz*

$$\psi(x) = A \cdot \sin(Bx) \quad (8.33)$$

mit zwei noch offenen Konstanten  $A$  und  $B$ . Zweimaliges Ableiten dieser Funktion ergibt

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -B^2 \psi(x). \quad (8.34)$$



Das Einsetzen in (8.32) führt auf die folgende Bestimmungsgleichung für  $B$ :

$$-B^2 \cdot \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi(x) \quad (8.35)$$

Diese Gleichung ist dann erfüllt, wenn gilt:

$$-B^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0) \quad (8.36)$$

oder

$$B = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0)}. \quad (8.37)$$

Das Ergebnis dieser Rechnung ist also: Die Funktion

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}x\right) \quad (8.38)$$

erfüllt die die Differentialgleichung (8.31). Eine analoge Rechnung zeigt, dass die Kosinusfunktion

$$\psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}x\right) \quad (8.39)$$

ebenfalls eine Lösung ist.

Die Differentialgleichung (8.31) bezieht sich nur auf das Innere des Potentialtopfs. Damit  $\psi(x)$  wirklich eine Lösung der Schrödingergleichung darstellt, müssen die Potentialwände bei  $x = 0$  und  $x = a$  berücksichtigt werden. Sie garantieren, dass ein Elektron nicht in den Aussenraum eindringen kann. Die Wahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$ , ein Elektron dort zu finden, ist Null. Als zusätzliche Bedingung an die Wellenfunktion ist also zu stellen, dass sie im Aussenraum des Potentialtopfs und an seinen Wänden zu Null wird. Insbesondere gilt als **Randbedingung**:

$$\psi(x = 0) = 0 \quad \text{sowie} \quad \psi(x = a) = 0. \quad (8.40)$$

Diese Randbedingungen sind die gleichen wie bei einer bei  $x = 0$  und  $x = a$  eingespannten Saite. Im Fall der Saite bildeten sich **stehende Wellen** aus. Nur bestimmte Wellenlängen sind zulässig, denn nur sie „passen“ in das Intervall der Länge  $a$ . Etwas Analoges gilt für die Wellenfunktion  $\psi(x)$ . Die Randbedingungen (8.40) stellen eine zusätzliche Forderung an die Wellenfunktionen (8.38) und (8.39) dar, die nur *bestimmte Energiewerte* der Elektronen im Potentialtopf zulassen.

Prüfen wir nach, wie die Randbedingungen zu erfüllen sind. Die Bedingung  $\psi(x = 0) = 0$  wird von der Sinusfunktion automatisch erfüllt, während sie für die Kosinusfunktion unerfüllbar ist. Letztere scheidet also als Lösung der Schrödinger-Gleichung aus.

Damit die zweite Bedingung,  $\psi(x = a) = 0$ , erfüllt ist, muss das Argument der Sinusfunktion ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$  sein. Es muss gelten:

$$\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}a = n \cdot \pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (8.41)$$

oder aufgelöst nach  $E$ :

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0. \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (8.42)$$

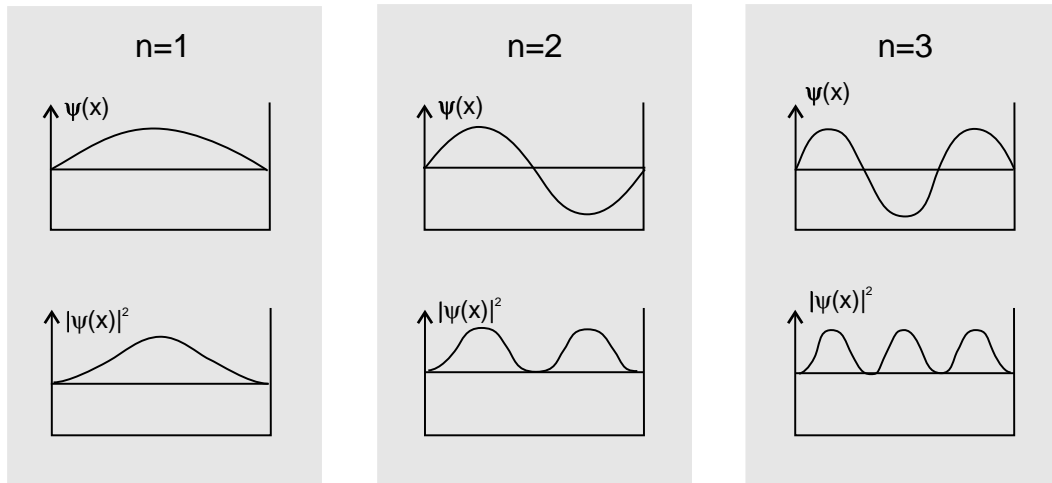


Abbildung 8.13: Wellenfunktionen (oben) und Wahrscheinlichkeitsdichten (unten) für die ersten drei Zustände im Potentialtopf

Die Energie der Elektronen im Potentialtopf kann nur die durch diese Gleichung zugelassenen Werte annehmen. Dies ist ein ganz zentrales Ergebnis der Quantenmechanik. Es besitzt allgemeine Gültigkeit: **Gebundene Elektronen können nur bestimmte Werte der Energie annehmen.** Im Fall des Potentialtopfs werden die möglichen Energiewerte durch die ganze Zahl  $n$  beschrieben, die man als **Quantenzahl** bezeichnet. Zu jedem Wert von  $n$  gehört ein bestimmter Wert von  $E$ .

**Die Energie von Elektronen in einem Potentialtopf der Breite  $a$  mit unendlich hohen Wänden ist *quantisiert*. Sie kann nur die Werte**

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0. \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8.43)$$

**annehmen, die durch die Quantenzahl  $n$  gekennzeichnet werden.**

Die Wellenfunktionen für die Zustände mit  $n = 1, 2, 3$  sind in Abb. 8.13 oben dargestellt. Die Analogie mit den stehenden Wellen bei der eingespannten Saite ist offensichtlich. Unten in der Abbildung sind die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten  $|\psi(x)|^2$  aufgetragen.

Als letztes muss die bisher noch unbestimmte Konstante  $A$  in der Wellenfunktion (8.38) festgelegt werden. Berücksichtigt man die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$ , muss man die Forderung stellen, dass man bei einer Messung das Elektron mit Sicherheit *irgendwo* im Potentialtopf finden muss. Integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(x)|^2$  über die gesamte Breite des Potentialtopfs, muss sich daher die Wahrscheinlichkeit 1 ergeben:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (8.44)$$

**Auswertung des Integrals:** Um das Integral zu berechnen, vereinfachen wir zuerst das Argument der Wellenfunktion (8.38) mit Hilfe von Gleichung (8.41). Die Wellenfunktion wird damit

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (8.45)$$

Wir haben also zu berechnen

$$\int_0^a A^2 \cdot \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) \cdot dx \quad (8.46)$$

Das Integral kann man selbst berechnen (durch partielle Integration und Ausnutzen der Identität  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$ ) oder in einer Integraltabelle nachschlagen. Es ergibt sich:

$$A^2 \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right]_{x=0}^a \quad (8.47)$$

Nach Einsetzen der Integralgrenzen werden alle Terme bis auf einen zu Null und man erhält als Ergebnis

$$A^2 \cdot \frac{1}{2} a. \quad (8.48)$$

die Konstante  $A$  soll so gewählt werden, dass dies zu 1 wird. Das ist der Fall, wenn

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (8.49)$$

Mit diesem Wert für  $A$  können wir die vollständige Wellenfunktion noch einmal zusammenfassend hinschreiben:

**Die stationären Zustände von Elektronen in einem unendlich hohen Potentialtopf der Breite  $a$  werden durch folgende Wellenfunktionen beschrieben:**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{a} x \right). \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8.50)$$