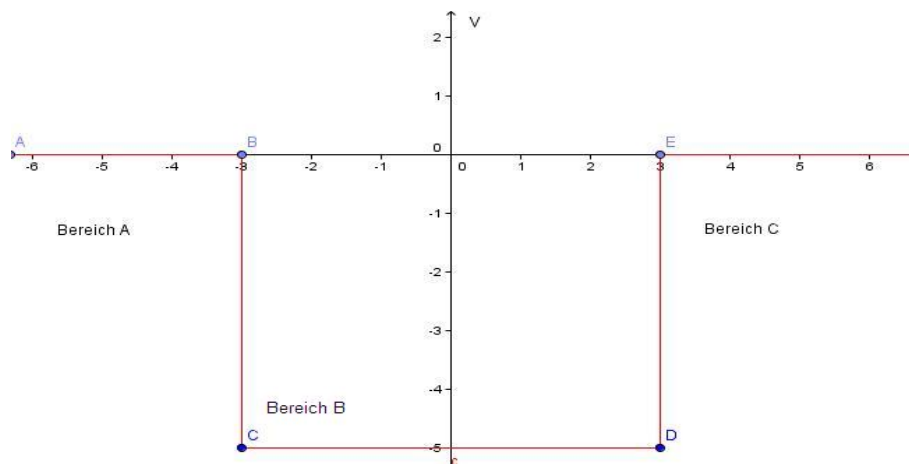


Der endliche Potentialtopf

Im Fall von endlich großen Anziehungskräften muss die unendliche Potentialbarriere durch eine endliche Potentialbarriere ersetzt werden. Das führt dann zu einem Potentialtopf mit endlich hohen Potentialwänden. Dies kann man durch die folgende Definition des Potentials verwirklichen:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < x_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

In der Zeichnung:



Die Zielsetzung, die man an dieser Stelle verfolgen ist die Frage, welche Unterschiede sich zu dem unendlichen, linearen Potentialtopf sich ergeben. Unterschiede machen sich zunächst bei der Wellenfunktion bemerkbar und damit auch bei der Wahrscheinlichkeitsdichte. Wir gehen dabei folgendermaßen vor:

- Wellenfunktion im Bereich A , B und C definieren.
- Die Wellenfunktion ist eine stetig, differenzierbare Funktion, solange das Potential nur eine endliche Anzahl von endlichen Unstetigkeitsstellen (Singularitäten) vorliegen. Dies ist der wichtigste Unterschied zu dem unendlichen Potentialtopf.
- Das bedeutet, dass die erste Ableitung der Wellenfunktion eine stetige Funktion ist.
- Über die Stetigkeitsbedingungen an den Rändern der einzelnen Definitionsrändern ergibt sich dann die komplette Wellenfunktion.
- Der Bereich A und der Bereich C stellen die klassisch verbotenen Gebiete dar.
- Aus der Impulsunschärferelation von Heisenberg kann man auch die Energieunschärferelation herleiten in der Form:

$$\Delta E \cdot \Delta t > h$$

Damit ist die Energie eine unscharfe Messgröße, die um den Betrag ΔE abweichen kann. Im Bereich A und C ist die Energie des Potentialwalls größer als die Gesamtenergie des Teilchens ist. Weil aber die Energie um ΔE abweichen kann, ist es vorstellbar, dass ein Teilchen dennoch eine Gesamtenergie aufweisen kann, die über der Energie des Potentialwalls liegt. Daher kann ein Teilchen auch im klassisch verbotenen Gebiet vorkommen. Weil aber die Wellenfunktion auf allen Bereichen stetig sein muss, folgt, dass die Wellenfunktion in diesen Bereichen gegen 0 konvergieren muss und diese Konvergenz am besten durch eine Exponentialfunktion beschrieben wird. Das gleiche ist über den Bereich C auszusagen.

- Im Bereich B hat man eine stehende Welle vorliegen, da es sich hier um klassisch erlaubtes Gebiet handelt.
- Bei der Wellenfunktion muss man zwischen einer zur V- Achse symmetrischen Funktion handelt (gerade Parität) oder ob es sich um eine zum Ursprung punktsymmetrische Wellenfunktion handelt (ungerade Parität).

Wellenfunktionen über die Schrödinger Gleichung

Wir werden für alle drei Bereiche die zeitunabhängige Schrödinger- Gleichung aufstellen und diese lösen. So entstehen in jedem Bereich die einzelnen Wellenfunktion.

Schrödinger- Gleichung in A und C

In diesem Bereich hat die Schrödinger- Gleichung das bekannte Aussehen:

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(x) = 0$$

Man setzt $k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E$ und vereinfacht damit die Schrödinger Gleichung zu:

$$\Psi''(x) + k^2(x) \Psi(x) = 0$$

Im gebundenen Zustand gilt $V_0 < E < 0$ damit ist aber $k(x)$ im realen nicht definiert, daher setzt man die komplexe Größe κ ein:

$$-\kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} |E|$$

Damit vereinfacht sich die Schrödinger Gleichung zu:

$$\Psi''(x) - \kappa^2 \Psi(x) = 0$$

Diese Gleichung wird gelöst durch die Funktion:

$$\Psi_A(x) = \alpha \cdot e^{\kappa x}$$

Dies ist in der Übereinstimmung mit der Konvergenzforderung für $x \rightarrow -\infty$ für die Wellenfunktion, da

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha \cdot e^{\kappa x} = 0$$

Im Bereich C ändert sich nur das Vorzeichen des Exponenten, weil in diesem Bereich die Funktion für $x \rightarrow \infty$ gelten muss:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_C(x) = 0$$

Die obenstehend vereinfachte Schrödinger- Gleichung wird auch durch die Funktion:

$$\Psi_C(x) = \gamma \cdot e^{-\kappa x}$$

Schrödinger- Gleichung und Wellenfunktion für B

Die Schrödinger-Gleichung lautet in dem klassisch erlaubten Gebiet:

$$\Psi''(x) - k(x)^2 \Psi(x) = 0$$

wobei in diesem Fall

$$k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$$

In diesem Fall wird die Schrödinger- Gleichung gelöst durch die Funktion:

- Für gerade Parität:

$$\Psi_B(x) = \beta \cdot \cos kx$$

- Für ungerade Parität

$$\Psi_B(x) = \beta \cdot \sin kx$$

Koeffizientenbestimmung über die Anschlussbedingung

Zunächst wird die Wellenfunktionen mit gerader Parität. Die Anschlussbedingungen sagen aus, dass die Funktionswerte an den Stellen $-q$ und q übereinstimmen müssen. Das gleiche gilt für die Werte der Ableitungsfunktion der Wellenfunktionen:

$$\alpha e^{-\kappa q_0} = \beta \cos(-kq_0)$$

Für die Ableitungen gilt an dieser Stelle

$$\alpha \kappa e^{-\kappa q_0} = -\beta k \sin(-kq_0)$$

Aus Symmetriegründen liefert die Stelle q_0 keine neuen Beiträge, woraus unmittelbar folgt:

$$\alpha = \gamma$$

Um α und β zu bestimmen, löst man das Gleichungssystem der Anschlussbedingungen nach α und β auf: Aus der ersten Gleichung folgt:

$$\beta = \frac{\alpha e^{-\kappa q_0}}{\cos(-kq_0)}$$

Diesen Term setzt man nun in die zweite Gleichung ein und erhält:

$$\alpha \kappa e^{-\kappa q_0} = k \frac{\alpha e^{-\kappa q_0}}{\cos(-kq_0)} \sin(-kq_0)$$

Das liefert die Gleichung, mit deren Hilfe die diskreten Energieniveaus festgelegt werden:

$$\kappa = k \tan(-kq_0)$$

Für die gerade Parität lautet dann die Wellenfunktion:

$$\Psi(x) = \alpha \left\{ \begin{array}{ll} e^{\kappa x} & \text{für } -\infty < x < q_0 \\ \frac{e^{-\kappa q_0}}{\cos(-kq_0)} \cos kx & \text{für } -q_0 < x < q_0 \\ e^{-\kappa x} & \text{für } q_0 < x < \infty \end{array} \right\}$$

Fazit: Vergleich vom endlichen und unendlichen Potentialtopf

- Die Energieniveaus von unendlichen und endlichen Potentialtopf stimmen miteinander über ein.
- Man spricht von gebundenen Zuständen, wenn die Gesamtenergie des Teilchens kleiner als der endliche Wall der potentiellen Energie des endlichen Potentialtopfs ist. Im anderen Fall werden die Zustände als Streuzustände genannt.
- Bei gebundenen Zuständen hat ein Teilchen eine Gesamtenergie, die unter der des Potentialwalls liegt. Daher dürfte sich kein Teilchen außerhalb des Topfs befinden. Aufgrund der Energieunschärferelation

$$\Delta E \cdot \Delta t > h$$

kann es aber vorkommen, dass ein Teilchen eine Energie besitzt, die aufgrund der Energieunschärfe eine Gesamtenergie besitzt, die über der Energie des Potentialwalls liegt und es sich daher außerhalb des klassisch erlaubten Gebiets befinden kann.

- Aufgrund der Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeitsdichte muss gefordert werden, dass im klassisch verbotenen Bereich die Wellenfunktion eines gebundenen Zustands im klassisch verbotenen Gebiet gegen 0 konvergieren.

Der Tunneleffekt

Aus der Betrachtung des endlichen Potentialtopfs ist bekannt, dass ein Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit in eine Potentialbarriere eindringen kann. Hat diese Barriere nicht eine zu große Breite, dann kann das Teilchen nicht nur in die Barriere eindringen, sondern durch die Barriere selbst durchdringen und sich dannach in klassisch verbotenem Gebiet aufhalten. Dieser Effekt wird als **Tunneleffekt** bezeichnet.

- Das an der Barriere ankommende Teilchen besitzt eine sinusförmige Wellenfunktion.
- Innerhalb der Barriere ergibt sich aufgrund der Randbedingungen und der Schrödinger-Gleichung eine streng monoton abnehmende Exponentialfunktion als Wellenfunktion des Teilchens.
- Nach der Barriere ist die Wellenfunktion wieder sinusförmig, allerdings mit einer reduzierten Amplitude.

Qualitativ wird die Tunnelwahrscheinlichkeit mit dem Transmissionskoeffizienten T und dem Reflexionskoeffizienten R beschrieben. Dabei gilt:

$$T + R = 1$$

Diese Forderung ergibt sich aus der Überlegung, dass ein Teilchen entweder an der Barriere reflektiert wird oder durch sie durchtunnelt. Für den Transmissionskoeffizienten ergibt sich:

$$T = e^{-2GL}$$

Dabei ist G festgelegt durch

$$G = \sqrt{\frac{8\pi^2m(E_{\text{pot}} - E)}{h^2}}$$

G erfolgt aus der Überlegung heraus, dass das Teilchen vor dem Tunneln oder der Reflexion an der Barriere durch die Barriere selbst gebunden sein muss und damit die in der Formel stehende Energiedifferenz positiv ist, da $E < E_{\text{pot}}$. Im Fall von makroskopischen Teilchen ist T sehr klein, was somit wieder im Einklang mit der klassischen Physik steht.

Das Zentralpotential

Das Zentralpotential spielt vor allem bei der Erforschung des Wasserstoffatoms eine große Rolle. Das Zentralpotential hat in der klassischen Mechanik ein Analogon in dem Potential eines Gravitationsfelds. Die potentielle Energie im Feld eines Protons von einem Elektron ist gegeben durch

$$E_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Setzt man dieses Potential in die Schrödingergleichung ein, dann erhält man die folgende Differentialgleichung:

$$\Psi'''(x, y, z) = -\frac{8\pi^2 m_e}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(x, y, z)$$

Um die Gleichung zu lösen, werden die x, y, z Koordinaten transformiert in die sogenannten Kugelkoordinaten, die aus Radius r , Raumwinkel θ und φ . Die so umgeformte Schrödinger- Gleichung lässt sich in drei Gleichungen zerlegen, die jeweils nur eine Koordinate enthält. Für die Koordinate r sieht die transformierte Schrödinger- Gleichung folgendermaßen aus:

$$\Psi''(r) + \frac{2}{r}\Psi'(r) + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \Psi(r) = 0$$

Energie im Grundzustand

Die so transformierte Schrödinger Gleichung und vor allem die in ihr vorliegenden erste und zweite Ableitung legen für die Differentialgleichung den Lösungsansatz nahe:

$$\Psi(r) = e^{-\frac{r}{a}}$$

Die erste und zweite Ableitung dieser Funktion sieht wie folgt aus:

$$\Psi'(r) = -\frac{1}{a} e^{-\frac{r}{a}}$$

$$\Psi''(r) = \frac{1}{a^2} e^{-\frac{r}{a}}$$

Diese Lösungen werden nun in die Schrödinger- Gleichung eingesetzt:

$$\frac{1}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} - \frac{2}{r} \cdot \frac{1}{a} e^{-\frac{r}{a}} - \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) e^{-\frac{r}{a}} = 0$$

Nach Umformung ergibt sich:

$$\frac{1}{r} \left(-\frac{2}{a} + \frac{2\pi \cdot m_e e^2}{\epsilon_0 h^2} \right) + \frac{1}{a^2} + E \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} = 0$$

Der erste Summand zeigt eine Abhängigkeit von r , die anderen sind alle konstant. Weil nun die Lösungsfunktion diese letzte Gleichung für alle Werte von r erfüllen muss, muss jeder Summand 0 ergeben. Diese Überlegung führt zu der Forderung:

$$-\frac{2}{a} + \frac{2\pi m_e}{\varepsilon_0 h^2} = 0$$

Diese Gleichung ist nun nach a aufzulösen und ergibt:

$$a = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2}$$

Damit kann man nun unter Ausnutzung der folgenden Gleichung E im Grundzustand berechnen:

$$E \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} = -\frac{1}{a^2}$$
$$E \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} = -\frac{1}{\left(\frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2}\right)^2}$$

Umgeformt ergibt dies:

$$E_1 = -\frac{1}{8} \frac{m_e e^4}{\varepsilon_0^2 h^2}$$

Dies ist eine Lösung, die mit der Lösung aus dem Bohrschen Atommodell übereinstimmt und ein Beleg für die Konsistenz der Quantentheorie ist.