B: Schrödinger-Gleichung für die Bewegung eines qmT im äußeren Potenzial U(<u>r</u>,t).
 Statistische Interpretation der Wellenfunktion (Max Born, 1927)

In 1925, Erwin Schrödinger, 'made an educated guess' und postulierte: Für die Bewegung des qmT in  $U(\underline{r},t)$  lautet die gesuchte Gleichung für die (i.a. komplexe) Wellenfunktion  $\psi(\underline{r},t)$ 

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \psi(\underline{\mathbf{r}},t) + U(\underline{\mathbf{r}},t) \psi(\underline{\mathbf{r}},t) \qquad \rightarrow \qquad \text{Schrödinger-Gleichung}$$
 (1.2)

• Statistische Interpretation der Wellenfunktion (WF) als Wahrscheinlichkeitsamplitude (Max Born, 1927):

$$\left|\psi(\underline{\mathbf{r}},\mathbf{t})\right|^2 d^3 \mathbf{r} = \psi(\underline{\mathbf{r}},\mathbf{t})\psi^*(\underline{\mathbf{r}},\mathbf{t})d^3 \mathbf{r} \tag{1.3}$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das qmT zum Zeitpunkt  $t \in (t, t+dt)$  im Volumenelement  $d^3r$  aufzufinden.

Wegen der statistischen Interpretation interessieren uns nur die normierbaren Lösungen  $\psi(\underline{r},t)$  der SG (1.2), für die

$$\int_{V} d^{3}r \left| \psi(\underline{r}, t) \right|^{2} = 1 \quad \text{(für alle t)}$$
 (1.4)

gilt, wobei V der zugängliche Raumbereich ist. Da mit  $\psi(\underline{r},t)$  auch const· $\psi(\underline{r},t)$  Lösung von (1.2), ist die Forderung der Normierbarkeit unproblematisch, solange  $\psi(\underline{r},t)$  <u>quadratisch</u> integrabel ist.

Die statistische Interpretation der WF/QM ist eine der Ursachen für die konzeptionellen Schwierigkeiten der QM; ihrer tiefere Analyse führt auf die Unschärfe-Relation, s.u.

#### • Statistische Interpretation und Zeitinvarianz

**KM:** NBG  $m \frac{d^2 \underline{r}}{dt^2} = \underline{F}$  für die Bahnkurve  $\underline{r}(t)$  ist invariant gegen Zeitumkehr  $t \to -t$ . Mit der Bewegung  $\underline{r}(t)$  ("Film vorwärts") verstößt auch die Bewegung  $\underline{r}(-t)$  ("Film rückwärts") gegen kein einziges Gesetz der KM.

**QM:** Mit  $\psi(\underline{r},t)$  ist auch  $\psi^*(\underline{r},-t)$  (nicht jedoch  $\psi(\underline{r},-t)$ !) Lösung der SG, denn diese ist invariant unter  $t \to -t$  nur bei gleichzeitiger komplexer Konjugation. Damit ist aber die für die Messung relevante Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte invariant gegenüber Zeitumkehr

$$\psi(\underline{r},t)\psi^*(\underline{r},t) \xrightarrow{t \to -t} \psi(\underline{r},-t)\psi^*(\underline{r},-t) = \psi^*(\underline{r},-(-t))\psi^{**}(\underline{r},-(-t)) = \psi^*(\underline{r},t)\psi(\underline{r},t) ,$$

d.h. auch die SG beschreibt eine reversible Zeitentwicklung.

#### • Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Nach einfachen Umformungen erhält man aus der SG  $\frac{\partial}{\partial t} \left( \psi^* \psi \right) = \frac{i\hbar}{2m} \underline{\nabla} \cdot \left( \psi^* \underline{\nabla} \psi - \psi \underline{\nabla} \psi^* \right) \ also$ 

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div}\underline{j} = 0 \quad \text{mit } w := \psi^*\psi \quad \text{und } \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m}\underline{\nabla} \cdot \left(\psi\underline{\nabla}\psi^* - \psi^*\underline{\nabla}\psi\right). \tag{1.5}$$

Gleichung (1.5) ist die Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte w, d.h. <u>j</u> ist die <u>Wahrscheinlichkeitsstromdichte</u>. Die Kontinuitätsgleichung kann als lokale Formulierung der Normierungsbedingung (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit) interpretiert werden.

Beweis Übungsblatt:

**FAZIT**: Die Gleichungen (1.2) bis (1.4) bilden die Basis der Schrödinger'schen Wellendynamik. Es hat sich gezeigt, dass sie nichtrelativistische Teilchen ohne Spin korrekt beschreiben.

#### • Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial U(<u>r</u>)

KM: NBG

$$m\frac{d^2\underline{r}}{dt^2} = -\operatorname{grad} U(\underline{r}) \left[ \frac{d\underline{r}}{dt}, m\frac{d^2\underline{r}}{dt^2} \cdot \frac{d\underline{r}}{dt} + \frac{d\underline{r}}{dt} \cdot \operatorname{grad} U(\underline{r}) = 0, \frac{d}{dt} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{d\underline{r}}{dt} \right)^2 + U(r) \right] = 0$$

→ Energieerhaltung bei Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial.

**QM:** SG 
$$i\hbar \frac{\partial \breve{\psi}(\underline{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \breve{\psi}(\underline{r},t) + U(\underline{r}) \breve{\psi}(\underline{r},t)$$

Lösung durch Trennung der Variablen (Separationsansatz):  $\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})T(t)$ 

$$i\hbar\psi\frac{dT}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}T\underline{\nabla}^2\psi + U\psi T \quad \left| : \psi T \neq 0 \right. \\ \rightarrow \underbrace{i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt}}_{\underline{r-unabhängig}} = \underbrace{\frac{1}{\psi}\bigg(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\psi + U\psi\bigg)}_{\underline{t-unabhängig}} = \operatorname{const} =: E$$

linke Seite: 
$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = E \rightarrow T(t) = T_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$
.

Vergleichen wir das mit dem de-Broglie-Postulat  $\psi(\underline{r},t) = \psi_0 \, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$  für das freie qmT folgt  $E = \hbar \, \omega$ , d.h., die Separationskonstante entspricht der Energie.

rechte Seite: Der ortsabhängige Anteil der Wellenfunktion genügt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\psi(\underline{r}) + U(\underline{r})\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \rightarrow \text{ station\"{a}re Schr\"{o}dinger-Gleichung.}$$
 (1.6)

**FAZIT:** Bei Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial ist die WF  $\widetilde{\psi}(\underline{r},t) = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{1}{\hbar}Et}$ , wobei  $\psi(\underline{r})$  die Lösung der stationären SG und E die (zulässigen Werte für die) Energie des qmT sind. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig, denn

$$\left|\widetilde{\psi}(\underline{r},t)\right|^{2} = \widetilde{\psi}(\underline{r},t)\widetilde{\psi}^{*}(\underline{r},t) = \psi(\underline{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad \psi^{*}(\underline{r})e^{+\frac{i}{\hbar}Et} = \psi(\underline{r})\psi^{*}(\underline{r}) = \left|\psi(\underline{r})\right|^{2} ;$$

wir sprechen von stationären Zuständen.

#### Bemerkungen:

(i) Kompakte Schreibweise der SG unter Verwendung des Hamilton-Operators Ĥ

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\underline{r},t) , \quad \hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r},t) \rightarrow \text{Hamilton-Operator}$$
 (1.2a)

Formal kann Ĥ aus der klassischen Hamilton-Funktion des physikalischen Systems

$$\begin{split} &H(\underline{p},\underline{r},t) = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r},t) \text{ ""uber die Ersetzung } H(\underline{p},\underline{r},t) \to \hat{H}(\hat{\underline{p}},\hat{\underline{r}},t) \text{ unter Verwendung von} \\ &\underline{p} \to \hat{\underline{p}} = -i\hbar \underline{\nabla}, \ \underline{r} \to \hat{\underline{r}} = \underline{r} \text{ gebildet werden}. \end{split}$$

(ii) Werden in der Energie-Impulsrelation des klassischen Teilchens

$$E = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r}, t) \text{ bzw. " } E\psi = \frac{\underline{p}^2}{2m} \psi + U(\underline{r}, t) \psi \text{ "}$$

Energie und Impuls durch die Operatoren

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \ \underline{p} \leftrightarrow -i\hbar \underline{\nabla} = \underline{\hat{p}}$$

ergibt sich die SG

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \psi(\underline{r},t) + U(\underline{r},t) \psi(\underline{r},t)$$

(die damit natürlich nicht hergeleitet worden ist).

## **Quanten in Kästen und Töpfen: Potenzialtopf, Potenzialstufe, Potentialschwelle** (Tunneleffekt)

#### 2.1 Eindimensionale Bewegung eines qmT im zeitunabhängigen Potenzial U(x)

Bei eindimensionaler Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial U(x) ist die WF  $\widetilde{\psi}(x,t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\quad\text{wobei}\;\;\psi(x)\,\text{die Lösung der stationären SG}$ 

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$
 (2.1)

und E die der WF  $\psi(x)$  entsprechende Energie des qmT ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) (und die qm Erwartungswerte, s.u.) sind zeitunabhängig (stationärer Zustand). Als WF kommen nur die <u>normierbaren</u>, <u>eindeutigen</u>, <u>stetigen</u> und <u>stetig</u> <u>differenzierbaren</u> Lösungen von (2.1) in Frage.

#### • <u>Stetigkeit der WF</u>. Beachte:

(i) Ist U(x) stetig in x = a, dann ist wegen (2.1)  $\psi''|_a$  stetig in a. Damit sind  $\psi'|_a$  und  $\psi(a)$  stetig differenzierbar in a.

(ii) Hat 
$$U(x)$$
 einen endlichen Sprung in  $x=a$ , sind  $\psi'\big|_a$  und  $\psi(a)$  stetig und es gilt 
$$\lim_{\epsilon \to 0} \psi(a-\epsilon) = \lim_{\epsilon \to 0} \psi(a+\epsilon), \lim_{\epsilon \to 0} \psi'\big|_{a-\epsilon} = \lim_{\epsilon \to 0} \psi'\big|_{a+\epsilon} \text{ oder kurz } \psi_I(a) = \psi_{II}(a), \ \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a).$$

Beweis durch Annahme des Gegenteils: Hätte  $\psi(x)$  einen Sprung bei x=a, also  $\psi(x) \sim \theta(x-a) \text{, folgte } \psi''(a) \sim \delta'(x-a) \text{. Hätte } \psi'(x) \text{ einen Sprung bei } x=a \text{, also }$   $\psi'(x) \sim \theta(x-a) \text{, folgte } \psi''(a) \sim \delta(x-a) \text{. Beides stünde im Widerspruch zu}$   $\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \big[ E - U(x) \big] \psi(x) \text{, denn links hätten wir einen unendlich, rechts einen endlich }$  großen Sprung an der Stelle x=a.

#### Entartung der WF

Wenn zu einem Zustand mit der Energie E mehrere WF  $\psi_i(x)$ , i=1,2,...,n existieren, dann nennt man den Zustand n-fach entartet.

Bei der eindimensionalen Bewegung eines qmT in U(x) sind alle Energieniveaus <u>nicht</u> entartet.

Beweis durch Annahme des Gegenteils: Seien  $\psi_1$  und  $\psi_2$  Lösungen zwei verschiedene von (2.1) zum selben Wert der Energie E . Dann gilt (Punkte mit  $\psi_{1/2} = 0$  ausgenommen)

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \ also \ \psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1 = const.$$

Strebt die WF am Rand des zugänglichen Raumbereichs gegen Null, folgt

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$$
 d.h.  $\psi_1 = C\psi_2$ .

#### Symmetrie/Parität der WF

Für <u>symmetrische Potenziale U(x)</u>, U(x) = U(-x), ist mit  $\psi$ (x) auch  $\psi$ (-x) Lösung von (2.1) zum Energiewert E, denn wegen der fehlenden Entartung der WF folgt

$$\psi(x) = C \psi(-x) = C C \psi \left(-(-x)\right) = C^2 \psi(x) \ , \ \text{also} \quad C = \pm 1 \quad \text{und damit} \ \psi(x) = \begin{cases} \psi(-x) \\ -\psi(-x) \end{cases}.$$

Also sind die WF bei Bewegung in U(x) = U(-x) entweder gerade oder ungerade Funktionen von x.

#### • <u>Reellwertige WF</u>

Da U(x) reell, sind mit  $\psi(x)$  auch  $\psi^*(x)$  und die beiden reellen Kombinationen  $\psi(x) + \psi^*(x)$  oder i $[\psi(x) - \psi^*(x)]$  Lösungen der linearen (!) stationären SG (2.1). Damit können wir uns im vorliegenden Fall auf reelle WF beschränken.

**FAZIT:** Bei der eindimensionaler Bewegung eines qmT im Potential U(x) sind die normierbaren (quadratisch integrablen), eindeutigen (wenigstens  $\psi\psi^*$  sei eindeutig), stetigen und stetig differenzierbaren, nicht entarteten, reellen Lösungen von (2.1) physikalisch relevant; im Fall U(x) = U(-x) sind die Wellenfunktionen entweder gerade oder ungerade.

#### 2.2 Eindimensionale Bewegung qmT im stückweise konstanten Potenzial $U(x) = U_0$

→ "Quanten in Kästen und Töpfen", Approximation ortsabhängiger durch stückweise konstante Potenziale … . Die SG lautet in diesem Fall

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (U_0 - E)\psi(x) = 0,$$

hat also die Form der Schwingungsgleichung des harmonischen Oszillators (lineare ODE zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten).

Wie üblich verwenden wir den Exponentialansatz  $\psi(x) \sim e^{\lambda x}$  und finden

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 + (U_0 - E) = 0 \, \to \, \lambda_{1/2} = \pm \lambda, \ \lambda = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \; .$$

Offensichtlich sind zwei Fälle zu unterscheiden:

#### A: $E > U_0 \rightarrow klassisch erlaubter Bewegungsbereich$

$$\lambda \; \text{imagin\"{a}r} \; \rightarrow \; \text{setze} \; \; \lambda = i \, k \, , \; \; k \coloneqq \frac{1}{\hbar} \sqrt{2 m (U_{\scriptscriptstyle 0} - E)} \quad \text{reell} \label{eq:lambda}$$

$$\psi(x) = \underbrace{A\,e^{i\,kx}}_{\text{nach rechts}} + \underbrace{B\,e^{-i\,kx}}_{\text{nach links}} \qquad \qquad \text{de Broglie-Wellen mit} \quad p = \hbar\,k = \pm\sqrt{2m\,(E-U_0)} \;.$$

Wie in der KM gilt 
$$\frac{p^2}{2m} = E - U_0$$
.

Wie zu erwarten, ist die WF die eines freien qmT; lediglich E ist durch  $E-U_0$  zu ersetzen.

Merke: oszillatorisches Verhalten der WF im klassisch erlaubten Bereich.

## **B:** $\underline{E < U_0} \rightarrow \underline{klassisch \ verbotener \ Bewegungsbereich}$

$$\lambda \text{ reell } \rightarrow \psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}$$
.

Merke: Exponentielles (abklingendes) Verhalten der WF im klassisch verbotenen Bereich.

Ist der klassisch verbotene Bereich  $x_0 < x < \infty$ , folgt aus der Normierungsbedingung A = 0, also  $\psi(x) = B e^{-\lambda x}$ . Das kann zu endlichen AWD im klassisch verbotenen Bereich führen. QmT können in diese Bereiche eindringen und u.U. Potentialbarrieren überwinden.

Fazit: Bei Bewegung in stückweise konstanten Potenzialen ist die Lösung der stationären SG

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & \hbar k = \sqrt{2m(E - U_0)}, \text{ (klassisch erlaubte Bewegung)} \\ A e^{\lambda x} + B e^{\lambda x}, & \hbar \lambda = \sqrt{2m(U_0 - E)}, \text{ (klassisch verbotene Bewegung)} \end{cases}$$
 (2.2)

#### 2.3 Eindimensionale Bewegung qmT im Potenzialtopf. Diskrete Energienieveaus.

A: Zunächst betrachten wir einen Potenzialtopf mit ∞ hohen Wänden

$$U(x) = U(-x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| \ge a \end{cases}$$

### WF außerhalb des Topfes, $|x| \ge a$ :

$$E < U_0$$
, also  $\psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x}$ . Da  $\lambda = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \rightarrow \infty$  folgt unter

Berücksichtigung der Normierungsbedingung  $\psi(x) = 0$ ,  $|x| \ge a$ .

## WF innerhalb des Topfes, |x| < a:

$$E > U_0 = 0$$
, also  $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$  mit  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ .

Wie erwartet, sind die WF reell sowie gerade oder ungerade.

Bei  $x = \pm a$  müssen die Stetigkeitsbedingungen erfüllt sein.

Gerade WF: Aus  $\psi(x) = \psi(-x)$  folgt A = B und  $\psi(x) = 2A \cos(kx)$ .

Stetigkeitsforderung ergibt 
$$cos(ka) = 0$$
, also  $k = \frac{n\pi}{2a}$ ,  $n = 1, 3, 5, ...$  diskret !!

Ungerade WF: Aus 
$$\psi(x) = -\psi(-x)$$
 folgt  $A = -B$  und  $\psi(x) = -2$  i  $A \sin(kx)$ 

Stetigkeitsforderung ergibt sin(ka) = 0, also 
$$k = \frac{n \pi}{2a}$$
,  $n = 2, 4, 6, ... diskret !!$ 

Aufgrund der diskreten Werte für k sind auch die Werte für die zu den WF gehörenden Werte der Energie diskret, d.h. aus  $k \to k_n$  folgt

$$E \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, \ n = 1, 2, 3, ..., \rightarrow diskretes Energiespektrum$$

für die Bewegung qmT im unendlich tiefen Potenzialtopf.

#### Normierung der WF: Wegen

$$\begin{split} 1 &= \int\limits_{-\infty}^{\infty}\! dx \; C \cos k_n x \; C \cos k_n x =: I = C^2 \int\limits_{-a}^{a}\! dx \; \cos^2 k_n x = C^2 \int\limits_{-a}^{a} \frac{1}{k_n} d \big( \sin k_n x \big) \cos k_n x = \\ \frac{C^2}{k_n} \sin k_n x \cos k_n x \bigg|_{-a}^{a} - \frac{C^2}{k_n} \int\limits_{-a}^{a}\! dx \; \sin k_n x \; \big( -k_n \sin k_n x \big) dx = C^2 \int\limits_{-a}^{a}\! dx \; \sin^2 k_n x = \\ C^2 \int\limits_{-a}^{a}\! dx \; \big( 1 - \cos^2 k_n x \big) \; also \; 2 \, I = 2 = C^2 \int\limits_{-a}^{a}\! dx = C^2 2a \; bzw. \; C = \frac{1}{\sqrt{a}} \end{split}$$

finden wir für die geraden WF den Normierungsfaktor  $C = 1/\sqrt{a}$ ; das gleiche Resultat ergibt sich für die ungeraden WF.

Fazit: Im unendlich tiefen Potenzialtopf gilt

(i) Das Energiespektrum 
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}$$
,  $n = 1, 2, 3, ...$ 

- → ist diskret
- → der Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus wächst proportional zu n
- → je breiter der Topf, desto enger liegen benachbarte Energieniveaus beieinander

$$(ii) \quad \text{ Die Wellenfunktionen } \psi_n(x) = \left\{ \begin{array}{l} \displaystyle \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left( \frac{n \pi x}{2a} \right), \ n = 1, 3, 5, \ldots \\ \\ \displaystyle \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left( \frac{n \pi x}{2a} \right), \ n = 2, 4, 6, \ldots \end{array} \right\} \text{ für } \left| x \right| < a \\ \\ 0, \ \text{ für } \left| x \right| \ge a \\ \end{array}$$

 $\rightarrow$  sind reell, gerade oder ungerade und besitzen n -1 Knoten.

(iii) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\psi_{n}(x)\psi_{n}^{*}(x) = \begin{cases} \frac{1}{a}\cos^{2}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 1, 3, 5, ... \\ \frac{1}{a}\sin^{2}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n = 2, 4, 6, ... \end{cases}$$
 für  $|x| < a$ 

$$0, \text{ für } |x| \ge a$$

 $\rightarrow$  hat n Maxima innerhalb |x| < a.

Beispiele:

 $n = 1 \rightarrow Grundzustand$ 

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8 \text{ma}^2} \neq 0 \text{ (!)}; \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \rightarrow \text{kein Knoten)}; \quad \psi_1^2(x) = \frac{1}{a} \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$

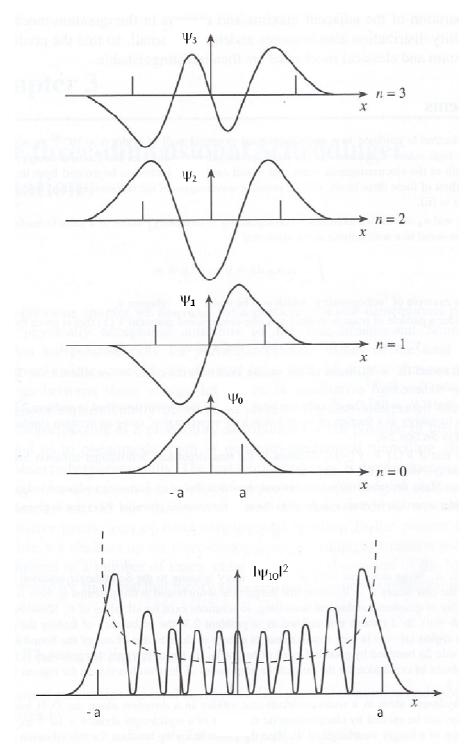
- $\rightarrow$  maximal im Zentrum x = 0 des Potenzialtopfes
- $\blacksquare \qquad n = 2 \rightarrow \underline{\text{erster angeregter Zustand}}$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \; ; \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \rightarrow \text{ein Knoten} \; ; \quad \psi_2^2(x) = \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \rightarrow \text{Maxima der}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei  $x = \pm \frac{a}{2}$ 

# **B**: Endlich tiefer Potenzialtopf $U(x) = \begin{cases} 0, |x| < a \\ U_0, |x| \ge a \end{cases}$ .

Analoge Rechnungen im Fall des endlich tiefen Potenzialtopfes ( $\rightarrow$  Übungsblatt) führen auf die gleichen Schlussfolgerungen (i) – (iii) oben mit modifizierten Ergebnissen für  $E_n$  und  $\psi_n(x)$ ; im Grenzfall  $U_0 \rightarrow \infty$  ergeben sich die hier diskutierten Ausdrücke (einschließlich der Rechtfertigung der Randbedingung  $\psi(\pm a) = 0$ .



#### Einfache Abschätzungen:

Proton im Atomkern:  $m_p \sim 91,7 \ 10^{-27} \ kg$ ,  $a \sim 2 \ 10^{-15} \ m$ 

Wir finden  $E_2 - E_1 \sim 5 \cdot 10^{-12} \text{ J} \sim 30 \text{ MeV}.$ 

Elektron im Potenzialtopf atomarer Abmessungen:  $m_e \sim 9,1 \, 10^{-31} \, kg$ ,  $a \sim 10^{-10} \, m$ 

Es ergibt sich  $E_n \sim 1,5\ 10^{-18}\ n^2$  J. Die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand ist  $E_2-E_1\sim 4,5\ 10^{-18}$  J  $\sim 28$  eV.

Die Wellenlänge eines beim Übergang  $E_2 - E_1$  emittierten Photons betrüge  $\lambda \sim 4,4\ 10^{-7}$  m, das ist die richtige Größenordnung vieler atomarer Übergänge.

■ Salzkorn:  $m \sim 10^{-10} \text{ kg}$ ,  $a \sim 10^{-6} \text{ m}$ 

 $E_n \sim 1,4~10^{-46}~n^2~J$  (!). Zum Vergleich die mittlere thermische Energie pro Freiheitsgrad bei 1 K (also nur Grad über dem absoluten Nullpunkt der Temperatur) ist kT  $\sim 10^{-23}~J$ , das entspräche  $n \sim 3~10^{11}$  und einem Abstand zwischen benachbarten Niveaus von  $\sim 8~10^{-35}~J$ . Diese feine Energiequantelung ist experimentell nicht auflösbar ...