

Kapitel 10

Potentiale

10.1 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 gehört die **Quantisierung der Energie**. Um dieses Phänomen zu verstehen, soll zuerst ein einfaches Modell für gebundene Elektronen betrachtet werden. Danach können wir dann zu komplizierteren und realistischeren Systemen übergehen.

Als Prototyp für gebundene Systeme, an dem alle wesentlichen Züge schon klar erkennbar sind, betrachten wir Elektronen, die in einem **Potentialtopf** gebunden sind; so bezeichnet man den in Abbildung (10.1) gezeigten Potentialverlauf.

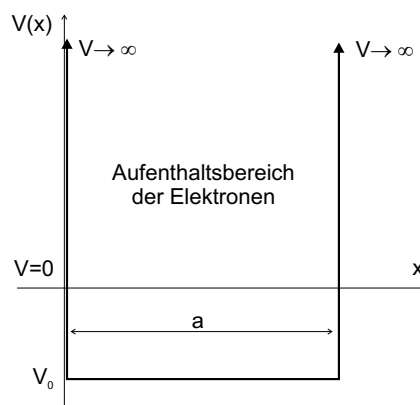


Abbildung 10.1: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

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, sondern 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.

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):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (10.1)$$

oder nach Umformung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \psi(x). \quad (10.2)$$

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

$$\psi(x) = A \cdot \sin(Bx) \quad (10.3)$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -B^2 \psi(x). \quad (10.4)$$

Das Einsetzen in Gleichung (10.2) führt auf die folgende Bestimmungsgleichung für B :

$$-B^2 \cdot \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi(x). \quad (10.5)$$

Diese Gleichung ist dann erfüllt, wenn gilt:

$$-B^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \quad (10.6)$$

oder

$$B = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0)}. \quad (10.7)$$

Das Ergebnis dieser Rechnung ist also die Funktion

$$\psi(x) = A \cdot \sin \left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} x \right), \quad (10.8)$$

die die Differentialgleichung (10.1) erfüllt. Eine analoge Rechnung zeigt, dass die Kosinusfunktion

$$\psi(x) = A \cdot \cos \left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} x \right) \quad (10.9)$$

ebenfalls eine Lösung ist.

Die Differentialgleichung (10.1) 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 $|\psi(x)|^2 \cdot \Delta V$, 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 somit als **Randbedingung**:

$$\psi(x = 0) = 0 \quad \text{sowie} \quad \psi(x = a) = 0. \quad (10.10)$$

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 (10.10) stellen eine zusätzliche Forderung an die Wellenfunktionen (10.8) und (10.9) 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 π sein. Es muss gelten:

$$\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} a = n \cdot \pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (10.11)$$

oder aufgelöst nach E :

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (10.12)$$

Die Energie der Elektronen im Potentialtopf kann nur die durch diese Gleichung zugelassenen Werte annehmen. Dies ist ein ganz zentrales Ergebnis der Quantenmechanik, welches allgemeine Gültigkeit besitzt: **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

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (10.13)$$

annehmen, die durch die Quantenzahl n gekennzeichnet werden.

Die Wellenfunktionen für die Zustände mit $n = 1, 2, 3$ sind in Abbildung (10.2) 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.

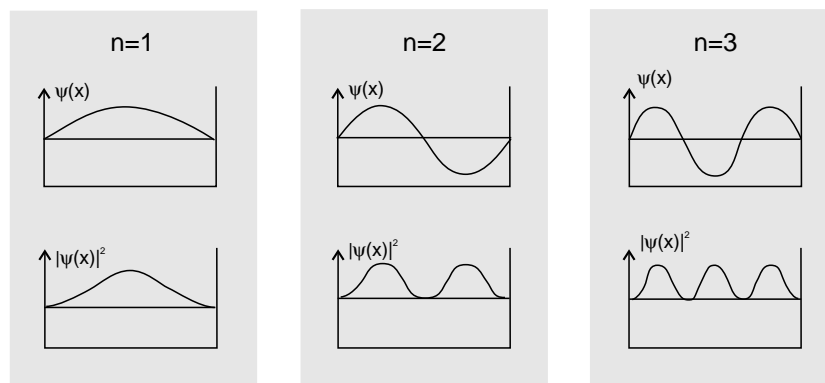


Abbildung 10.2: Wellenfunktionen (oben) und Wahrscheinlichkeitsdichten (unten) für die ersten drei Zustände im Potentialtopf

Als Letztes muss die bisher noch unbestimmte Konstante A in der Wellenfunktion (10.8) 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:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (10.14)$$

Die Wellenfunktion wird somit „normiert“.

Auswertung des Integrals: Um das Integral zu berechnen, vereinfachen wir zuerst das Argument der Wellenfunktion (10.8) mit Hilfe von Gleichung (10.11). Die Wellenfunktion wird damit

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (10.15)$$

Wir haben also

$$\int_0^a A^2 \cdot \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) dx \quad (10.16)$$

zu berechnen. 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:

$$A^2 \left[\frac{1}{2} x - \frac{a}{4\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right]_{x=0}^a. \quad (10.17)$$

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

$$A^2 \cdot \frac{1}{2} a. \quad (10.18)$$

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

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (10.19)$$

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

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (10.20)$$

