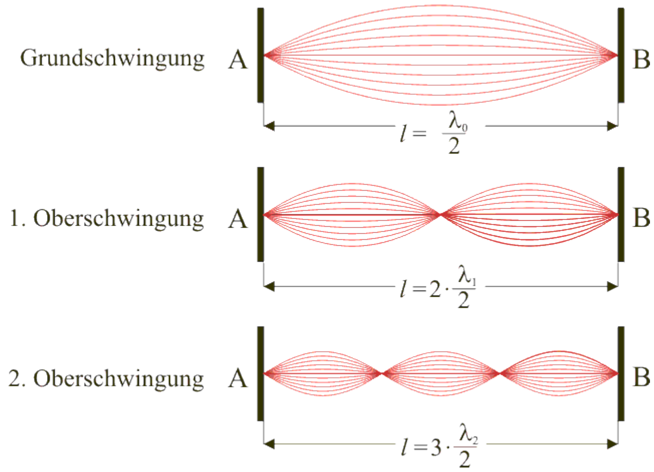
2.2 Der lineare Potenzialtopf

2.2.1 Diskrete Energieniveaus

Wie kann man erklären, dass Elektronen im Atom nur ganz bestimmte, diskret liegende Energieniveaus annehmen können?
Quantenmechanische Rechnungen mit der Schrödingergleichung zeigen, dass ein Teilchen in einem kleinen Aufenthaltsraum nur einzelne diskret liegende Zustände annehmen kann. Jeder Zustand wird durch eine Zustandsfunktion ψ („Psi“) beschrieben. Zu jedem Zustand gehört ein Orbital und ein ganz bestimmter Energiewert.

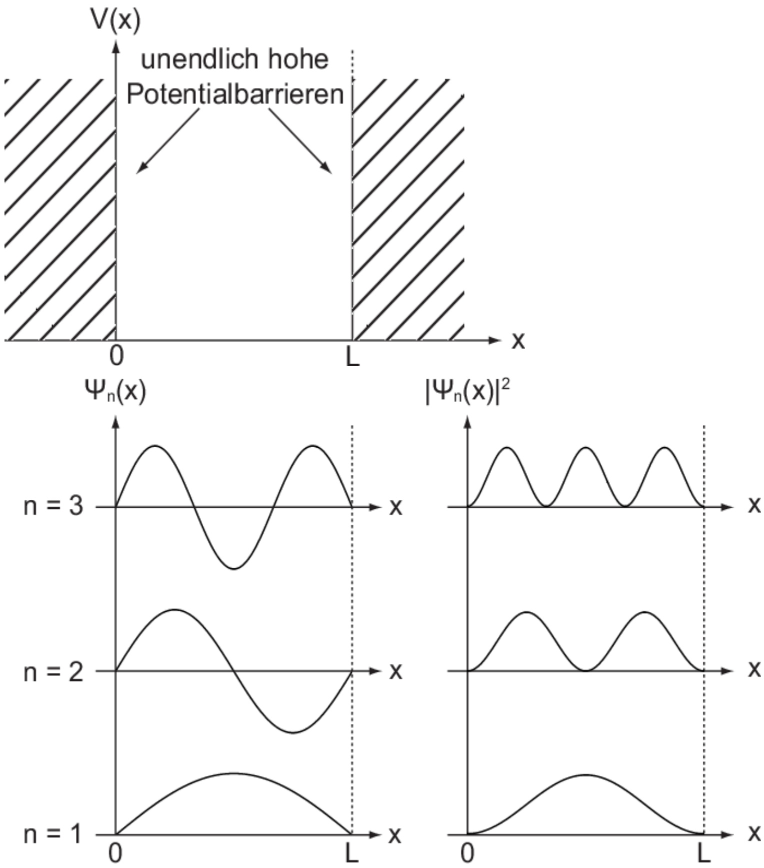
2.2.2 Mechanisches Analogon: Schwingungen eines Seils mit festen Enden

Der Aufenthaltsbereich eines Elektrons im Atom ist dreidimensional. Die Beschreibung ist entsprechend schwierig. Wir betrachten deshalb zunächst eine Materiewelle, die sich nur in einer Raumrichtung ausbreiten kann. Als mechanisches Analogon kennen wir die Wellen, die sich entlang eines Seils ausbreiten. Die Welle wird an den Enden reflektiert. Bei ganz bestimmten Anregungsfrequenzen erhält man durch Überlagerung der hin- und rücklaufenden Welle eine stehende Welle (siehe Abbildung).



2.2.3 Teilchen im Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden

Ein Teilchen kann sich längs einer Strecke mit der Länge l frei bewegen. Es bräuchte aber unendlich viel Energie, um ein Ende dieser Strecke zu überwinden. Für diesen Fall liefert die Schrödingergleichung Lösungen, die genau den stehenden Wellen an einem Seil entsprechen.



2. angeregter Zustand: $l = 3 \cdot \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow \lambda = \frac{2 \cdot l}{3}$

1. angeregter Zustand: $l = 2 \cdot \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow \lambda = \frac{2 \cdot l}{2}$

Grundzustand: $l = 1 \cdot \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow \lambda = \frac{2 \cdot l}{1}$

Allgemein gilt: $l = n \cdot \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow \lambda = \frac{2 \cdot l}{n}$

Daraus können wir den Impuls des Teilchens im Potenzialtopf berechnen:

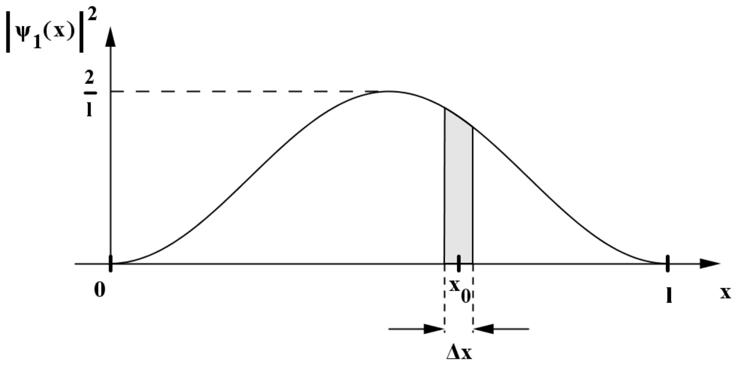
Die Gesamtenergie des Teilchens ist seine kinetische Energie, da die potenzielle Energie null ist. Man erhält:

Wenn die Masse m und die Länge l vorgegeben sind, dann gilt: $E_n \sim n^2$

Wenn die Masse m und die Zahl n vorgegeben sind, dann erhält man: $E_n \sim \frac{1}{l^2}$
Das bedeutet, dass die Energie des Teilchens im Grundzustand (n = 1) beliebig groß wird, wenn man die Länge l des Topfes immer weiter verringert.

2.2.4 Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Die Graphen der Wellenfunktionen ψ_n, welche die möglichen Zustände eines Elektrons im eindimensionalen Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden beschreiben, haben die gleiche Form wie stehende Wellen bei maximaler Auslenkung.
Man kann die **Zustände der Elektronen** als **stehende Materiewellen** (De-Broglie-Wellen) deuten.
$\psi_n(x)$ selbst kann im Experiment nicht gemessen werden, sondern nur $|\psi_n(x)|^2$
(vergleiche Lehrbuch Physik 12, Seite 60).



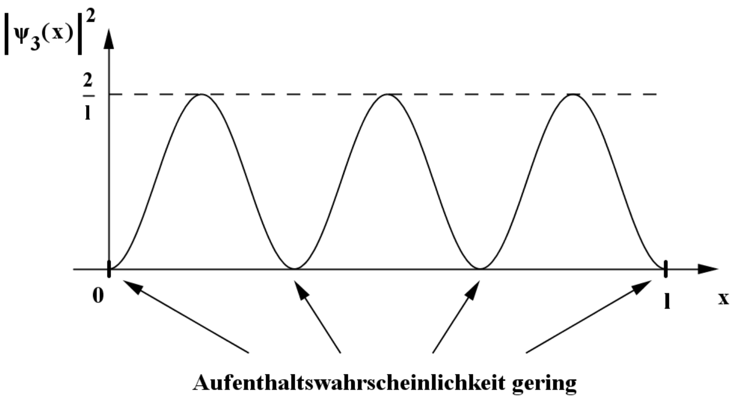
Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an der Stelle x_0 im kleinen Intervall Δx zu finden, ist

$$p = \int_{x_0 - \frac{\Delta x}{2}}^{x_0 + \frac{\Delta x}{2}} |\psi(x)|^2 \cdot dx$$

$$\approx |\psi(x_0)|^2 \cdot \Delta x$$

In der Nähe der Knoten der stehenden Welle ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gering, bei den Bäuchen ist sie maximal.

Beispiel:



Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron irgendwo im Intervall $[0; l]$ zu finden ist

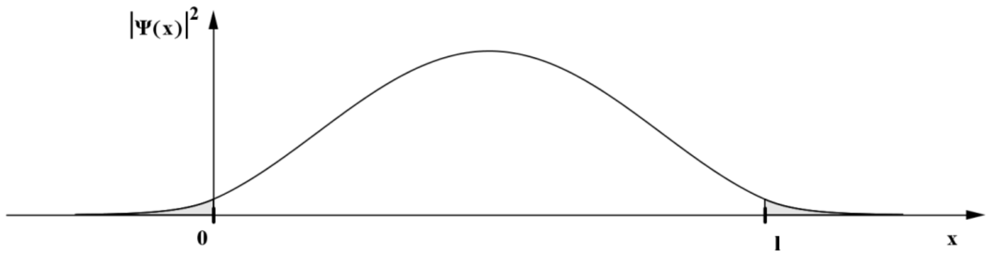
$$p_{ges} = \int_0^l |\psi(x)|^2 \cdot dx = 1.$$

Aus dieser Bedingung erhält man, dass die Maxima von $|\psi_n(x)|^2$ den Wert $\frac{2}{l}$ haben.

2.2.5 Der Potenzialtopf mit endlich hohen Wänden

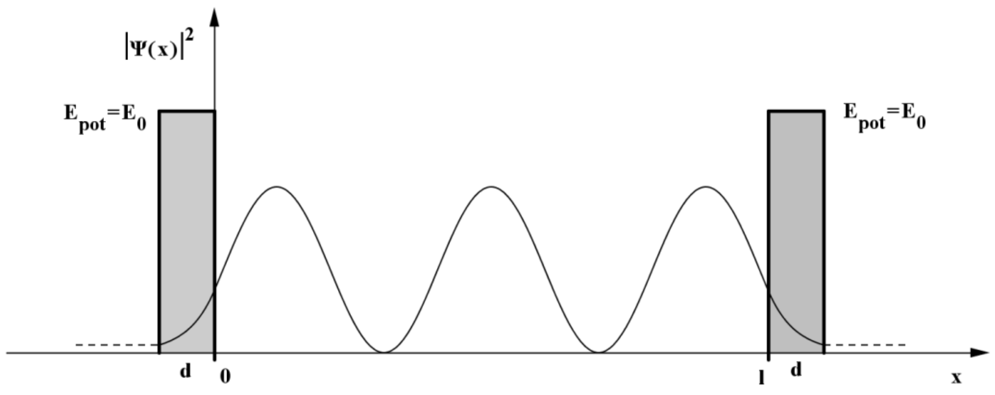
Ein Elektron kann sich entlang der Strecke von $x = 0$ bis $x = l$ frei bewegen. Um diesen Bereich verlassen zu können, müsste es als klassisches Teilchen mindestens die Energie E_0 besitzen.

Bei der quantenmechanischen Rechnung erhält man für $E < E_0$ physikalisch sinnvolle Lösungen der Schrödingergleichung nur für bestimmte, diskret liegende Energiewerte E_n, wenn man die Randbedingungen berücksichtigt, dass die Funktionen $\psi_n(x)$ bei $x = 0$ und bei $x = l$ differenzierbar sein müssen.
Die Graphen der zugehörigen Wellenfunktionen sehen fast genauso aus wie beim Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden, aber die Funktionen haben bei $x = 0$ und bei $x = l$ keine Nullstellen, d. h. mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit $p > 0$ befindet sich das Elektron außerhalb des Topfes, wo es klassisch bei der vorhandenen Energie E nicht sein könnte.



Die Fläche unter dem Graphen von $|\psi(x)|^2$ außerhalb des Intervalls $[0; l]$ ist ein Maß für diese Wahrscheinlichkeit p. Für den Fall $E \geq E_0$ liefert die quantenmechanische Rechnung eine Lösung für jeden beliebigen Wert von E.

2.2.6 Der Tunneleffekt



Wenn der Potenzialwall mit $E_{pot} = E_0$ am Rande des Potenzialtopfes nur eine geringe Breite d hat, dann ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Quantenobjekt außerhalb des Potenzialwalls größer als 0. Das Quantenobjekt kann also mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit p den Potenzialwall durchdringen, obwohl seine Energie E kleiner ist als E_0. Dieses Phänomen bezeichnet man als **Tunneleffekt**.
Bei einer bestimmten Breite d nimmt p zu, wenn die Höhe des Walls E_0 abnimmt.
Bei fester Höhe E_0 wird p größer, wenn die Breite d abnimmt.
Eine wichtige Anwendung des Tunneleffekts ist das Rastertunnelmikroskop.