MUSTERLÖSUNG 1

Aufgabe 1: a) Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet: $-j\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\cdot\Psi(\vec{r},t)$

Da der Potentialtopf eindimensional ist, kann man $\vec{r}$ mit x ersetzen. Außerdem ist das Potential zeitunabhängig, also gilt: $V(\vec{r},t) = V(x)$.

Damit ergibt sich: $-j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\Psi(x,t)$

Da V(x) zeitunabhängig ist, lässt sich den Separationsansatz $\Psi(x,t) = \Psi(x)\cdot\varphi(t)$ machen. Setzt man das ein:

$$-j\hbar\cdot\Psi(x)\cdot\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\varphi(t)\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + V(x)\cdot\Psi(x)\cdot\varphi(t)$$

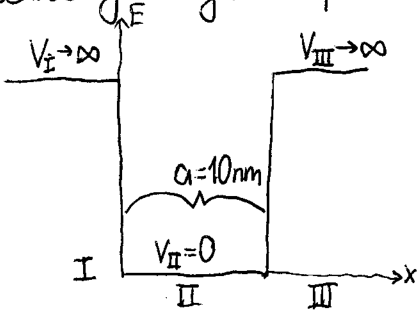
Dividiert man mit $\Psi(x)\cdot\varphi(t)$: $-j\hbar\cdot\frac{1}{\varphi(t)}\cdot\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\Psi(x)}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + V(x) \overset{!}{=} E$

Man sieht, dass die linke Seite nur zeitabhängig und rechte Seite nur ortsabhängig ist. Damit die Gleichung immer erfüllt werden kann, müssen beide Seiten gleich zu einer Konstante sein. Diese Konstante ist genau die Gesamt-Energie E. Damit kriegt man zwei Gleichungen:

(1) $\boxed{\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + V(x)\cdot\Psi(x) = E\cdot\Psi(x) \Rightarrow \text{zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung}}$

(2) $-j\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = E\cdot\varphi(t)$

In dem ersten Teil der Aufgabe (Teilaufgaben a, b, c) wird die zeitunabh. Schrödinger-Gl. gelöst. Dafür betrachte man zuerst die Struktur des Potentialtopfs. Der hat ein stückweise konstantes Potential in 3 Bereichen (siehe nebenst. Bild). In den Bereichen I und III gibt es Potentialbarierren, die unendlich hoch sind. Im Bereich II ist das Potential Null. Es gilt also:



$$V(x) = \begin{cases} \infty & , -\infty < x \leq 0 \\ 0 & , 0 \leq x \leq a \\ \infty & , a \leq x < \infty \end{cases}$$

Wenn man dieses Potential in die Schrödinger-Gl. einsetzt, dann gilt in II: $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) = E\cdot\Psi(x)$ (3)

In den Bereichen I und III muss $\Psi = 0$ gelten, da sonst der Term $V(x)\cdot\Psi(x)$ divergiert und (1) nicht mehr erfüllt werden kann. Das heißt physikalisch, dass das Elektron sich nicht in I oder III befinden darf, also lediglich im Topf.

b) Die Randbedingungen ergeben sich hier aus der Bedingung, dass $\Psi(x)$ in $\mathbb{R}$ stetig sein soll. Da $\Psi(0^-) = 0$ und $\Psi(a^+) = 0$ gelten (siehe Teilaufgabe a), lauten die Randbedingungen:

- RB1: $\Psi(0) = 0$
- RB2: $\Psi(a) = 0$

c) Die Schrödinger-Gl. ist in den Bereichen I und III eigentlich schon gelöst (mit $\Psi = 0$). Nun soll die Lösung im Bereich II durchgeführt werden. Die Schrödinger-Gl. im Bereich II ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung der Variable x. Für die Lösung solcher DGLen (Abkürzung für Differentialgleichung) soll man einen geeigneten Ansatz machen. Da in (3) die Gleichheit einer zweiten Ableitung mit nullter Ableitung vorkommt, soll man eine Exponentialfunktion (e) oder sin, cos wählen, die äquivalent sind, da die Eulerformel besagt:

$e^{jx} = \cos x + j\sin x$.

Man muss natürlich die Exponentialfkt. mit konstanten Koeffizienten versehen, damit man die allgemeine Lösung kriegt. Der Ansatz lautet also:

$$\boxed{\Psi(x) = A\cdot e^{jkx} + B\cdot e^{-jkx}}$$

In diesem Ansatz gibt es drei Unbekannten A, B und k zu bestimmen. Berücksichtigt man die Randbedingungen:

- RB1: $\Psi(0)=0=A\cdot e^{jk\cdot 0}+B e^{-jk\cdot 0}=A+B \iff \underline{A=-B} \Rightarrow \Psi(x)=A e^{jkx}-A e^{-jkx}=A(e^{jkx}-e^{-jkx})$

Mit der Eulerformel kann man diese wie folgt umschreiben:

$\Psi(x)=A(\cancel{\cos kx}+j\sin kx-\cancel{\cos kx}+j\sin kx)=2Aj\cdot\sin kx \Rightarrow \boxed{\Psi(x)=C\cdot\sin kx}$ mit C, eine komplexe Konstante.

- RB2: $\Psi(a)=0=C\cdot\sin(ka)$

sin(x) ist nur dann null, wenn x ein Vielfaches von π ist, also wenn $x=n\cdot\pi$ gilt. Also gilt hier:

$k\cdot a=n\cdot\pi \iff k=\frac{n\cdot\pi}{a} \Rightarrow \boxed{\Psi_n(x)=C\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{a}\cdot x\right)}$ mit $n=1,2,\ldots$

Hier sieht man, dass die Wellenfunktion von dem Parameter n abhängt. Nun bleibt eine Unbekannte, nämlich C übrig. Dieses wird über die Normierungsbedingung bestimmt.

Da $|\Psi(x)|^2$ die Intensität eines Elektrons an einem Ort ergibt oder anders gesagt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons ist, und da das Elektron sich irgendwo befinden soll, muss folgendes gelten:

$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2dx=1$. (Das Integral $\int_b^c|\Psi(x)|^2dx$ gibt die W.keit, dass ein Elektron sich im Intervall $x\in[b,c]$ befindet)

Es kann selbstverständlich auch der Fall vorkommen, in dem es kein Elektron gibt (trivialer Fall). Dann gilt C=0 und $\Psi=0$ ist überall die Lösung. Laut Angabe soll es aber doch ein Elektron geben.

Nun setze man $\Psi_n(x)$ in die Normierungsbedingung ein:

$$\int |C|^2\cdot|\sin^2(\tfrac{n\pi}{a}x)|dx=|C|^2\cdot\int_0^a\sin^2(\tfrac{n\pi}{a}x)dx=|C|^2\cdot\int_0^a\frac{1-\cos(\frac{2n\pi}{a}x)}{2}dx=|C|^2\cdot\left[\frac{x}{2}-\frac{a}{4n\pi}\cdot\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a=\frac{|C|^2 a}{2}\overset{!}{=}1$$

$\Psi=0$ außerhalb

Es gilt der trigonometrische Zusammenhang $\sin^2(\xi)=\frac{1-\cos(2\xi)}{2}$.

$\Rightarrow |C|^2=\frac{2}{a} \Rightarrow C=\sqrt{\frac{2}{a}}\cdot e^{j\phi}$

Die beliebige Phase ϕ von C kann zur Einfachheit halber zu Null gesetzt werden ($\phi=0$). Daraus folgt $C=\sqrt{\frac{2}{a}}$ und

$\boxed{\Psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{a}\cdot x\right)}$

Damit wird die Schrödinger-Gl. gelöst. Nun soll die Wellenlänge λ des emittierten Lichts gefunden werden. Es gilt $c=\lambda\cdot f$ und $E=h\cdot f$ aus Physik. Man kann damit schreiben:

$f=\frac{c}{\lambda} \Rightarrow E=\frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda=\frac{hc}{E}$

Nun soll die Energie des emittierten Lichts berechnet werden. Dafür setze man $\Psi_n(x)$ in (3) ein:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)=E_n\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \iff \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{n^2\pi^2}{a^2}\cdot\left(-\cancel{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}\right)=E_n\cancel{\sin\left(\frac{n\pi}{a}\cdot x\right)} \iff \boxed{E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot n^2}$$

Hier sieht man, dass die Energie eines Elektrons nur diskrete Werte einnehmen kann.

Wenn bei dem gegebenen Laser ein Elektron um ein Atom von einem energetisch höher liegenden Niveau (hier n=2) zu einem energetisch tiefer liegenden Niveau (hier n=1) übergeht, wird die freiwerdende Energie (hier E_2-E_1) in Form eines Photons, also als Licht abgestrahlt. Das Photon hat natürlich die Energie E_2-E_1.

Also in diesem Fall gilt: $E=E_2-E_1$. E_2 und E_1 kann man durch Einsetzen wie folgt bestimmen:

$$E_1=\frac{\hbar^2\cdot\pi^2}{2m^*a^2}\cdot 1^2=\frac{\hbar^2\cdot\pi^2}{2\,0{,}041\,m_0\cdot a^2}=\frac{(6{,}6\cdot 10^{-16}\,eVs)^2\cdot\pi^2}{2\cdot 0{,}041\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}kg\cdot(1\cdot 10^{-8}m)^2}=91{,}83\,meV$$

(es gilt $\frac{kgm^2}{s^2}=J$ und $1eV=1{,}6\cdot 10^{-19}J$)

effektive Masse, des Elektrons, die die Kristallstruktur [illegible]

Masse eines Elektrons: $m_0=9{,}1\cdot 10^{-31}kg$

$$E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^* a^2}\cdot 2^2 = \frac{4\hbar^2\pi^2}{2\cdot 0{,}041\cdot m_0 a^2} = \frac{4\cdot(6{,}6\cdot 10^{-16}\,eVs)^2\cdot\pi^2}{2\cdot 0{,}041\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\,kg\cdot(1\cdot 10^{-8}\,m)^2} = 367{,}32\,meV$$

$$\Rightarrow E = E_2 - E_1 = 367{,}32\,meV - 91{,}83\,meV \approx 275\,meV$$

Und nun kann man die Wellenlänge durch Einsetzen berechnen:

$$\underline{\underline{\lambda}} = \frac{h\cdot c}{E} = \frac{6{,}62\cdot 10^{-34}\,Js\cdot 3\cdot 10^{8}\,\frac{m}{s}}{275\cdot 10^{-3}\,eV\cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}} = 4{,}5\cdot 10^{-6}\,m = \underline{\underline{4{,}5\,\mu m}}$$

Zusatz: d) Die zeitabhängige Schrödingergleichung wird gelöst, indem sie durch einen Separationsansatz in zwei Gleichungen getrennt wird und die beiden separat gelöst werden. Sowohl die Trennung als auch die Lösung der zeitunabhängigen Gleichung werden schon durchgeführt. Nun soll (2) gelöst werden, die wie folgt lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = \frac{-E}{j\hbar}\cdot\varphi(t) = \frac{jE}{\hbar}\cdot\varphi(t)$$

Diese Gleichung ist eine DGL 1. Ordnung bzgl. der Zeit und kann einfach mit dem Ansatz $\varphi(t) = C_1 e^{jC_2 t}$ gelöst werden, da die Ableitung von e-Fkt. auch e-Fkt. ist. Durch Einsetzen in (2) erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t}C_1 e^{jC_2 t} = \frac{jE}{\hbar}C_1 e^{jC_2 t} \Longleftrightarrow \cancel{j}\cancel{C_1}C_2\cancel{e^{jC_2 t}} = \frac{\cancel{j}E}{\hbar}\cancel{C_1}\cancel{e^{jC_2 t}} \Rightarrow C_2 = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \varphi(t) = C_1\cdot e^{j\frac{E}{\hbar}t}$$

Außerdem soll laut Angabe $\Psi_n(x,0) = \Psi_n(x)\cdot\varphi(0) = \Psi_n(x)$ gelten, also $\varphi(0) = 1$. Das impliziert, dass $C_1 = 1$ gilt. Also folgt:

$$\varphi(t) = e^{j\cdot\frac{E}{\hbar}\cdot t} \Longrightarrow \boxed{\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{a}\cdot x\right)\cdot e^{j\cdot\frac{E}{\hbar}\cdot t}}$$

(Mit $E = \hbar\omega$ gilt: $e^{j\frac{E}{\hbar}t} = e^{j\omega t}$ $\Rightarrow$ die bekannte Zeitabhängigkeit der Materiewellen.)

So wird die zeitabhängige Schrödinger-Gl. mit gegebenen Randbedingungen gelöst.

Nun soll wieder $|\Psi_n(x,t)|^2$ betrachtet werden, da genau diese Größe eine physikalische Bedeutung hat. Es lautet:

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = |\Psi_n(x)\cdot\varphi(t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2\cdot|\varphi(t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2\cdot\underbrace{\left|e^{j\cdot\frac{E}{\hbar}t}\right|^2}_{=1\text{ (da die }e^{jx}\text{-Fkt. immer die Länge 1 hat.)}} = |\Psi_n(x)|^2$$

Die Gleichheit $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2$ besagt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron sich an einem festen Ort x befindet (für beliebige x) sich über die Zeit nicht ändert.

$\Rightarrow$ Elektronen ändern ihre Energiezustände ohne weiteres nicht. Damit so ein Übergang wie in der Angabe stattfindet, muss eine äußere Störung wie z.B. eine gezielte optische oder thermische Anregung auftreten.