Lösung der eindimensionalen, stationären Schrödingergleichung für den linearen Potentialtopf

Für den linearen Potentialtopf gilt: Die Wände sind unendlich hoch und zwischen den Wänden hat das Teilchen keine potentielle Energie (weil dort keine Kräfte wirken sollen).
Das bedeutet $U(0) = \infty$ und $U(L) = \infty$.
Das führt dazu, dass an diesen Stellen das Teilchen nicht erwartet wird, also muss gelten $\Psi(0) = 0$ und $\Psi(L) = 0$ (das sind die sog. Randbedingungen zur Lösung der Differentialgleichung).

Die Schrödingergleichung in ihrer eindimensionalen und zeitunabhängigen Form lautet:

$$\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \cdot \Psi''(x) + E \cdot \Psi(x) = 0.$$

Zur Lösung dieser homogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung suchen wir eine Funktion, die zweimal abgeleitet sich selbst mit anderem Vorzeichen ergibt. Dies ist bei den Funktionen sin(x) oder cos(x) der Fall. Da $\Psi(x)$ an der Stelle x=0 verschwinden soll (Randbedingung), also gleich Null sein soll, wählen wir die Sinusfunktion in der Form:

$$\Psi(x) = A \cdot \sin(k \cdot x).$$

Dies leiten wir zweimal ab und setzen $\Psi(x)$ und deren Ableitung $\Psi''(x) = -k^2 \cdot A \cdot \sin(k \cdot x)$ in die Differentialgleichung ein:

$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \cdot k^2 + E\right) \cdot A \sin(k \cdot x) = 0$ und damit $\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \cdot k^2 + E\right) = 0$ woraus sich für k ergibt $k = \sqrt{\frac{8\pi^2 \cdot m \cdot E}{h^2}}$.

Jetzt werden die <u>Randbedingungen</u> verwendet, um weitere Informationen über k zu erhalten:

$\Psi(0) = A \cdot \sin(k \cdot 0) = 0$ ist klar,
$\Psi(L) = A \cdot \sin(k \cdot L) = 0$ wird erfüllt, wenn das Argument des Sinus den Wert π oder Vielfache davon annimmt (denn $\sin(\pi) = 0$ und $\sin(2\pi) = 0$ und $\sin(3\pi) = 0$ usw.), also muss gelten: $k \cdot L = n \cdot \pi$, was zu $k = \frac{n \cdot \pi}{L}$ führt.

Wenn wir nun die beiden Ausdrücke für k gleichsetzen, erhalten wir nach einigen Umformungen eine Formel für die Energie des Teilchens im Potentialtopf:

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 \cdot m \cdot E}{h^2}} = \frac{n \cdot \pi}{L} \quad \Leftrightarrow \quad E = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2$$

Die Energie $\boxed{E_n = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2}$ eines Teilchens in einem linearen Potentialtopf ist also gequantelt (Quantenzahlen n = 1, 2, 3, …).

Wir erhalten mithilfe der Schrödingergleichung das gleiche Ergebnis, wie mit dem „alten“ Ansatz einer stehenden Welle.

Jetzt können wir allerdings noch einiges mehr ablesen. Wir kennen jetzt die Wellenfunktion $\Psi(x)$ (bis auf die Amplitude A → darum kümmern wir uns gleich) und können durch quadrieren eine Aussage über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (**Orbitale**) machen.

$$\Psi(x) = A \cdot \sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \quad \rightarrow \quad \Psi^2(x) = A^2 \cdot \sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x)$$

Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** im Raumbereich dx an der Stelle x ist nach der *Bornschen* Interpretation der Wellenfunktion: $P(x) = \psi^2(x) \cdot dx$

Nun zur Amplitude A:

Sie folgt aus einer so genannten Normierungsbedingung: über den gesamten Raumbereich (also von 0 bis L) muss sinnvollerweise die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit 1 sein (mit 100%-tiger Sicherheit findet man das Teilchen zwischen 0 und L).
Diese Gesamt-Aufenthaltswahrscheinlichkeit muss durch Addition aller Einzelwahrscheinlichkeiten berechnet werden: $\int_0^L \Psi^2(x)\ dx = 1$

$$\int_0^L A^2 \cdot \sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x)\ dx = 1$$

Mathe-Info:
$$\int \sin^2(a \cdot x) = \frac{1}{2} \cdot x - \frac{1}{4 \cdot a} \cdot \sin(2a \cdot x)$$

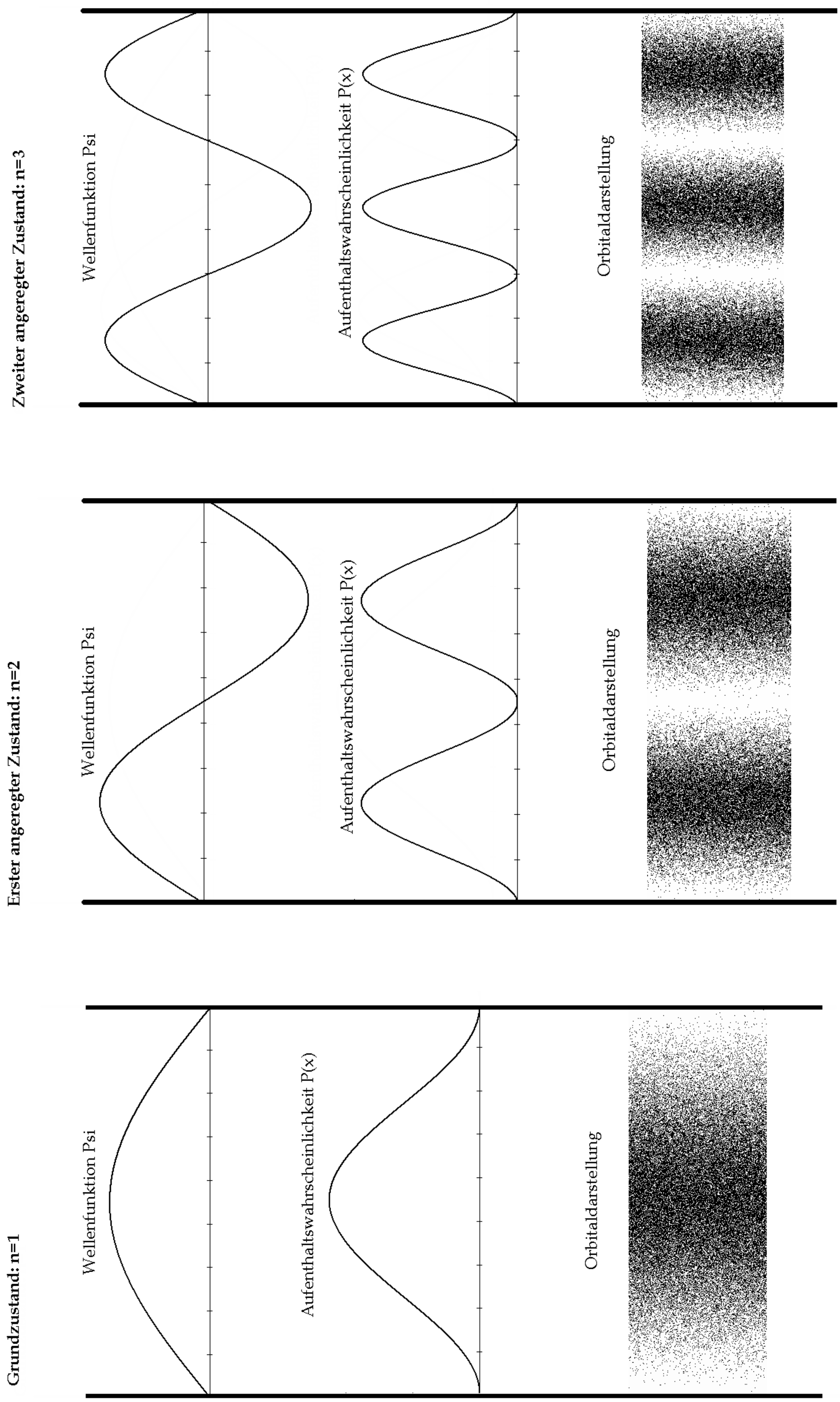
Mit der Auflösung des Integrals ergibt sich: $\frac{1}{2} \cdot A^2 \cdot L = 1$ und daraus $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Raumbereich dx um die Stelle x herum zu finden, ist also: $P_n(x) = \frac{2}{L} \cdot \sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \cdot dx$.
Diese Funktionen beschreiben die Orbitale, in denen sich das Teilchen aufhalten kann.

Orbitale werden häufig als Punktewolken dargestellt: Je dichter die Wolke, desto wahrscheinlicher ist es, dort das Teilchen zu finden.

Man kann sich die Abbildungen der Orbitale mithilfe von Punktewolken auch so entstanden denken: Der lineare Potentialtopf wird einige tausendmal hintereinander fotografiert. Das Teilchen erscheint bei jeder Aufnahme als schwarzer Punkt. Legt man die vielen Bilder alle (transparent) übereinander, ergeben sich die typischen Punktewolken.

Die folgenden Abbildungen zeigen den linearen Potentialtopf im Grundzustand und in den ersten beiden angeregten Zuständen.


Grundzustand: n=1
Wellenfunktion Psi
Aufenthaltswahrscheinlichkeit P(x)
Orbitaldarstellung
Erster angeregter Zustand: n=2
Wellenfunktion Psi
Aufenthaltswahrscheinlichkeit P(x)
Orbitaldarstellung
Zweiter angeregter Zustand: n=3
Wellenfunktion Psi
Aufenthaltswahrscheinlichkeit P(x)
Orbitaldarstellung