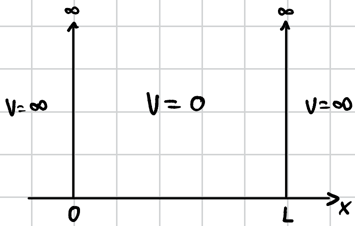
ÜS 12 – Quantenmechanik II

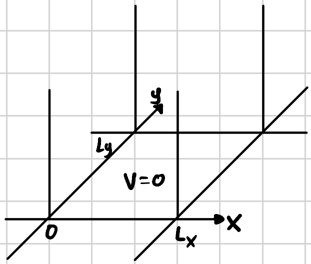
Für das Teilchen im 1D-Kasten hatten wir letzte Stunde folgendes hergeleitet:



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \qquad V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \le x \le L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$$

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \qquad n = 1, 2, 3, \dots, \infty \qquad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Jetzt wollen wir das Modell des Teilchens im Kasten auf höhere Dimensionen ausweiten, sodass wir mit dem 2D-Kasten beginnen



$$\hat{T}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \qquad \hat{V}_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \le x \le L_x, 0 \le y \le L_y \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = E\psi$$

Das Problem ist, dass die SG hier eine partielle DGL ist, dessen Lösung nicht trivial ist (mehr im 3. Sem. in PDE).

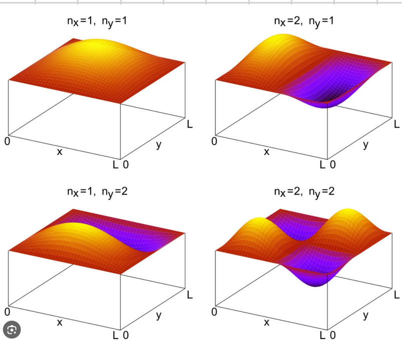
Wenn in der Quantenmechanik die Dimensionalität von nicht gekoppelten Systemen erhöht wird ist der Produktansatz sehr gut. Man geht davon aus, das eine Lösung des Problems gerade das Produkt der eindimensionalen Probleme ist.

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \qquad \psi = \psi_x \cdot \psi_y \cdot \psi_z \qquad E = E_x + E_y + E_z$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) X(x)Y(y) = E\, X(x)\, Y(y)$$

Aus dem Produktansatz können wir die Lösung des 2D-Kastens herleiten:

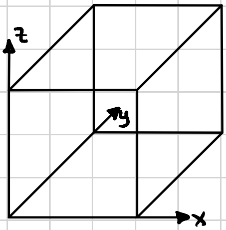
$$\psi(x,y) = X(x)\cdot Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\cdot\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) \qquad E_{n_x,n_y} = \frac{h^2 n_x^2}{8mL_x^2} + \frac{h^2 n_y^2}{8mL_y^2} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$



Falls in der Klausur nach einem Ansatz zur Ermittlung der Energieeigenwerte auf Grundlage der gegebenen Wellenfunktion gefragt ist, muss der Hamiltonoperator auf die Wellenfunktion angewendet werden.

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_{n_x,n_y}(x,y) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\frac{2}{\sqrt{L_xL_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) \\
&= -\frac{2\hbar^2}{2m\sqrt{L_xL_y}}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)\right) \\
&= -\frac{2\hbar^2}{2m\sqrt{L_xL_y}}\left(-\frac{n_x^2\pi^2}{L_x^2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) - \frac{n_y^2\pi^2}{L_y^2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2\pi^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2\pi^2}{L_y^2}\right)\frac{2}{\sqrt{L_xL_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) \\
&= \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)\frac{2}{\sqrt{L_xL_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) = E_{n_x,n_y}\psi_{n_x,n_y}(x,y)
\end{aligned}$$

Selbiges gilt dann auf für den 3D-Kasten:



$$\hat{T}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{3D} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad \hat{V}_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \le x \le L_x, 0 \le y \le L_y, 0 \le z \le L_z \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$E = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

Aufgabe 2: Neutronen im zweidimensionalen Kasten **(Max. Punktzahl: 30)**

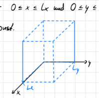
Wir wollen im Folgenden die Eigenschaften von Neutronen in einem zweidimensionalen Kasten untersuchen.

Hinweise:
- Masse eines Neutrons: $m_n = 1.674\,927\,498\,04(95) \times 10^{-27}$ kg
- Spin eines Neutrons: $I_n = 1/2$

2.a Wie lautet die Schrödingergleichung für ein Neutron in einem zweidimensionalen Kasten mit Kantenlängen L_x und L_y? Bezeichnen Sie die verwendeten Grössen. 3 P

Schr.gl.: $\hat{H}\psi_{n_x,n_y}(x,y) = E_{n_x,n_y}\psi_{n_x,n_y}(x,y)$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_n}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)}_{\Delta} + V(x,y)$ mit $V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \le x \le L_x \text{ und } 0 \le y \le L_y, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$



$V(x,y)$: Potential als Fkt. von x und y
$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$: Laplace Operator in 2D
$\hat{H}$: Hamiltonoperator
E_{n_x,n_y}: Eigenwerte
$\psi_{n_x,n_y}(x,y)$: Eigenfunktionen
n_x, n_y: Quantenzahlen
$\hbar$: red. Planck-Konstante
(m_n: Masse Neutron) steht oben

2.b Geben Sie Ausdrücke für die Energieeigenwerte und Eigenfunktionen dieses Systems an. Was ist der Wertebereich der entsprechenden Quantenzahlen? 3 P

x- und y-Probleme separabel.

$E_{n_x,n_y} = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_x^2}{2m_n L_x^2} + \frac{\hbar^2\pi^2 n_y^2}{2m_n L_y^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$

$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)$

$n_x, n_y = 1, 2, \dots, \infty$

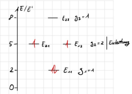
2.c Bestimmen Sie die vier energetisch tiefsten Zustände und stellen Sie diese in einem Energieniveaudiagramm für die Fälle (i) $L_x = L_y$ und (ii) $L_x = \sqrt{2}L_y$ graphisch dar. Achten Sie auf korrekte Achsenbeschriftungen. Gibt es entartete Zustände? Wenn ja, geben Sie die entsprechenden Entartungsfaktoren an. 6 P

i) $L_x = L_y = L$

$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n}\left(\frac{n_x^2}{L^2} + \frac{n_y^2}{L^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}(n_x^2 + n_y^2)$

$E' := \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}$

4 energetisch tiefste Zustände: $E_{11}, E_{12}, E_{21}, E_{22}$

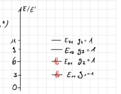


ii) $L_x = \sqrt{2}L_y = L \iff L_y^2 = \frac{L^2}{2}$

$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n}\left(\frac{n_x^2}{L^2} + \frac{2n_y^2}{L^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}(n_x^2 + 2n_y^2)$

$E' := \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}$

4 energetisch tiefste Zustände: $E_{11}, E_{21}, E_{12}, E_{31}$



Wir betrachten im Folgenden einen zweidimensionalen Kasten, der vier Neutronen beinhaltet.

2.d Handelt es sich bei Neutronen um Fermionen oder Bosonen? Welche Konsequenzen müssen beim Einfüllen der Neutronen in den zweidimensionalen Kasten berücksichtigt werden? 2 P

Neutronen sind Fermionen, da $I_n = 1/2$ (halbganzzahlig).
$\Rightarrow$ Es dürfen nicht 2 Neutronen in allen QZ übereinstimmen.

2.e Um den Grundzustand des aus vier Neutronen bestehenden Systems zu bestimmen, füllen Sie die Neutronen gemäss dem Pauliprinzip in den quadratischen (Fall (i) in Teilaufgabe 2.c) und den rechteckigen Kasten (Fall (ii) in Teilaufgabe 2.c) ein. Welchen Gesamtspin erwarten Sie für die beiden Fälle? 2 P

Hinweis: Tragen Sie die Neutronen in das Energieniveaudiagramm ein, das Sie in Teilaufgabe 2.c zeichneten.

i) Triplett oder Singulett
$I_{tot} = 1$ oder $I_{tot} = 0$

Hund'sche Regeln nicht anwendbar (diese gelten nur für Elektronen im GZ in einem Atom)
$\Rightarrow$ wir wissen nicht, ob Singulett oder Triplett stabiler

ii) Singulett
$I_{tot} = 0$

Um die Fälle eines quadratischen und eines rechteckigen Kastens vergleichen zu können, werden die Kastenflächen A gleich gross gewählt. Als Realisierung dieser Situation werden für die Kantenlängen die folgenden Grössen gewählt:

(i) Quadratischer Kasten: $L = 1$ fm (entsprechend der Grösse eines Atomkerns; $A = 1\,\text{fm}^2$)
(ii) Rechteckiger Kasten: $L_x = 2^{1/4}$ fm, $L_y = 2^{-1/4}$ fm; $A = 1\,\text{fm}^2$

2.f Bestimmen Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Gesamtenergie für den Grundzustand des Systems mit vier Neutronen für den Fall eines quadratischen (Fall (i) in Teilaufgabe 2.c) und eines rechteckigen Kastens (Fall (ii) in Teilaufgabe 2.c) und berechnen Sie die entsprechenden Grundzustandsenergien. Welche Kastengeometrie ist energetisch günstiger? 5 P

$E' := \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}$ mit $L = 1$ fm

$E'' := \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n L^2}$ mit $L = 2^{1/4}$ fm $\qquad E'' = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_n 2^{1/2}\,\text{fm}^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}E'$

i) $E_{GZ} = 2\cdot E_{11} + 2\cdot \underbrace{E_{21}}_{=E_{12} \text{ im quadratischen Kasten}} = 2\cdot 2E' + 2\cdot 5E' = 14E' = \underline{\underline{4.587\cdot 10^{-10}\,\text{J}}}$

ii) $E_{GZ} = 2\cdot E_{11} + 2\cdot E_{21} = 2\cdot 3E'' + 2\cdot 6E'' = 18E'' = \frac{18}{\sqrt{2}}E' = 9\sqrt{2}E'$
$= \underline{\underline{4.170\cdot 10^{-10}\,\text{J}}} < 14E'$

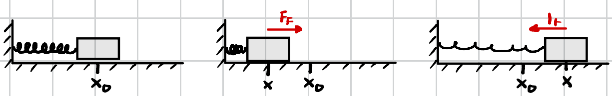
$\Rightarrow$ Der rechteckige Kasten ist energetisch günstiger als der quadratische.

2.g Wie gross ist die Wellenlänge der Strahlung, die benötigt wird, um im Falle des rechteckigen Kastens in Teilaufgabe 2.c ein Neutron des höchsten besetzten Energieniveaus in das nächsthöhere Energieniveau anzuregen? 4 P

$\Delta E = E_{12} - E_{21} = 9E'' - 6E'' = 3E'' = \frac{hc}{\lambda} \iff \lambda = \frac{hc}{3E''} = \frac{\sqrt{2}hc}{3E'} = 2.858\cdot 10^{-15}\,\text{m}$
$= \underline{\underline{2.858\,\text{fm}}}$

Bemerkung: Übergang im X-ray-Bereich, da Zustände im 2D-Kasten mit $A = 1\,\text{fm}^2$ ungefähr vergleichbar mit Energieniveaus in einem Atomkern.

Das gängige quantenmechanische Modell zur Beschreibung von Molekülschwingungen ist der harmonische Oszillator, der die Bewegung von zwei Atomkernen relativ zueinander in einem harmonischen Potenzial beschreibt. Für die rückstellende Kraft $\vec{F}_F(x)$ eines klassischen harmonischen Oszillators gilt:

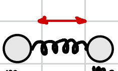


$F_F = -kx \qquad k \equiv$ Kraftkonstante Feder

Bewegungsgleichung: $F = m\ddot{x} = -kx \Rightarrow \frac{d^2x}{dt} + \frac{k}{m}x = 0 \qquad \omega^2 \equiv \frac{k}{m} \qquad \frac{d^2x}{dt} + \omega^2 x = 0$

Potenzial: $V(x) = -\int F(x)\,dx = -\int -kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2$

Damit ergibt sich die folgende Schrödingergleichung



$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \qquad \hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi - E\psi = 0$$

Das ist eine inhomogen DGL 2. Ordnung mit variablen Koeffizienten, welche man gd analytisch mittels Laplace Transformation lösen kann (siehe PDE). Dabei kommen die folgenden Energieeigenwerte und Eigenfunktionen raus:

$$E_v = h\nu_e\left(v+\tfrac{1}{2}\right) = hc\omega_e\left(v+\tfrac{1}{2}\right) \qquad \nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \qquad \omega_e = \frac{\nu_e}{c}$$

$$\psi_v(x) = \left(\frac{\alpha}{4^v (v!)^2 \pi}\right) H_v(\sqrt{\alpha}\,x)\, e^{-\alpha x^2/2} \qquad \alpha = \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \qquad H_v \text{ (Hermite-Polynome)}$$

Je grösser die Bindungsstärke, umso stärker ist die Kraftkonstante k bzw. die Schwingungsfrequenz ν_e. Für die Schwingungsquantenzahl v ist auch die null erlaubt, jedoch ist die Nullpunktenergie für $v=0$ des Harmonischen Oszillators von null verschieden.

$$E_0 = \tfrac{1}{2}h\nu_e = \tfrac{1}{2}hc\omega_e$$

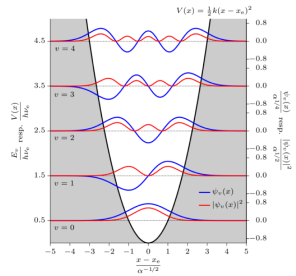


Abbildung 4.18.: Graphische Darstellung der Energieniveaus E_v und der Wellenfunktionen $\psi_v(x)$ (blaue Kurven) respektive deren Betragsquadrate $|\psi_v(x)|^2$ (rote Kurven) für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator. Zu beachten ist, dass auch in energetisch verbotenen Bereichen (grau markiert), in denen die totale Energie E_v kleiner ist als die potentielle Energie $V(x)$, eine von null verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit existiert.

Isotopomere Anpassung: Die Kraftkonstante k des harmonischen Oszillators bleibt bei Isomere ca. gleich ($k' = k$). Wenn nun ein Atom eines zweiatomigen Moleküls durch ein Isomer ersetzt wird, muss zunächst die reduzierte Masse neu berechnet werden:

$$m_2 \to m_2' \qquad \mu \to \mu' = \frac{m_1 m_2'}{m_1 + m_2'} \tag{2.42}$$

Das Verhältnis der Schwingungswellenzahlen ν_e/ν_e' für zwei Isotope berechnet sich demnach mit:

$$\frac{\nu_e}{\nu_e'} = \frac{\sqrt{\frac{k}{\mu}}}{\sqrt{\frac{k'}{\mu'}}} = \sqrt{\frac{\mu'}{\mu}} \tag{2.43}$$