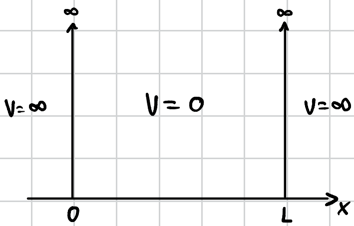
# Teilchen im Kasten

Das Teilchen im Kasten ist ein recht einfaches quantenmechanisches Modell bei dem sich ein Teilchen der Masse $m$ in einem Potenzialtopf mit unendlichen hohen Wänden befindet. Nach der klassischen Physik würde man unendlich viel Energie benötigen, dass sich das Teilchen ausserhalb des Kastens befindet.




Der Hamiltonian $\hat{H}$ setzt sich aus dem 1D Kinetikoperator $\hat{T}_{kin}$ und dem Potenzialoperator $\hat{V}_{pot}$ zusammen.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \qquad \hat{H} = \hat{T}_{kin,1D} + \hat{V}_{pot} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Das ergibt für die zeitunabhängige Schrödingergleichung im Kasten:

$$\hat{H}\psi = E\psi \iff \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \cancel{V}^{\,0\leq x \leq L}\right)\psi = E\psi \iff -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \iff \frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0$$

Es liegt eine homogene, lineare Differenzialgleichung 2. Ordnung mit konst. Koeff. vor, welche wir mit dem Euleransatz lösen können:

① Charakteristisches Polynom: $\chi(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 + E \overset{!}{=} 0$

② $-E = \frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 \iff -\frac{2mE}{\hbar^2} = \lambda^2 \implies \lambda = \pm i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ (kompl. konj. NS)

③ $\psi(x) = A\cancelto{1}{e^{0x}}\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\cancelto{1}{e^{0x}}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}x\right)$
$= A\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}x\right)$

Eine Bedingung für eine sinnvolle Wellenfunktion $\psi(x)$ ist, dass sie stetig ist und da für $x>L$ und $x<0$ für die Wellenfunktion $\psi=0$ gelten muss haben wir folgende Randbedingung: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$\psi(0) = A\cancelto{1}{\cos(0)} + B\cancelto{0}{\sin(0)} = A \overset{!}{=} 0$ $\quad \boxed{A=0} \quad n \in \mathbb{N}$

$\psi(L) = B\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L\right) \overset{!}{=} 0 \implies \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi \iff \frac{2mE}{\hbar^2}L^2 = n^2\pi^2$

Der Sinus wird null, wenn in seinem Argument $n\pi$ ist!

**Vorgehen: Homogene Lösung nach Euler-Ansatz**

1. Charakteristisches Polynom ($y^{(n)}(x) \Rightarrow \lambda^n$).
2. Nullstellen des Polynoms mit ggf. Polynomdiv.
3. Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \Rightarrow$ Fundamentallösungen:
   a) Unterschiedliche reelle Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$:
   $$y(x) = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x} + Ce^{\lambda_3 x}$$
   b) Mehrfache Nullstellen $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda$:
   $$y(x) = x^0 Ae^{\lambda x} + x^1 Ae^{\lambda x} + x^2 Ae^{\lambda x}$$
   Die Summanden werden sukzessive mit höheren Potenzen von $x$ multipliziert.
   c) Komplexe Nullstellen (in kompl. konj. Paaren) $\lambda = a \pm ib$:
   $$y(x) = Ae^{ax}\cos(bx) + Be^{ax}\sin(bx)$$
4. $y(x) =$ Summe der Fundamentallösungen

**Beispiel: Homogene DGL höherer Ordnung**

$$y''' - 2y'' - y' + 2y = 0$$
$$\textit{Euler} \Rightarrow \lambda^3 - 2\lambda^2 - \lambda + 2 = 0$$
$$\textit{Polyn.div.} \Rightarrow \textit{geratene Nullstelle: } \lambda_1 = 1$$
$$(\lambda^3 - 2\lambda^2 - \lambda + 2) : (\lambda - 1) = \lambda^2 - \lambda - 2$$
$$\lambda^2 - \lambda - 2 \overset{!}{=} 0$$
$$\lambda_{2,3} = -\frac{-1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + 2}$$
$$= \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4}} = \frac{1}{2} \pm \frac{3}{2} \begin{cases} \lambda_2 = 2 \\ \lambda_3 = 3 \end{cases}$$
$$y(x) = Ae^{x} + Be^{-x} + Ce^{2x}$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2}L^2 = n^2\pi^2 \Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{h^2n^2}{8mL^2} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad \boxed{E_n = \frac{h^2n^2}{8mL^2}}$$ Energieeigenwerte

Damit ergibt sich die Quantisierung durch die Erfüllung der Randbedingungen. Den Wert von E lässt sich nun in die Wellenfunktion einsetzen.

$$\psi_n(x) = B\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) = B\sin\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2mL^2}}\,x\right) = B\sin\left(\cancel{\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}}\,\frac{\cancel{\hbar}\, n\pi}{\cancel{\sqrt{2m}}\,L}x\right) = B\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

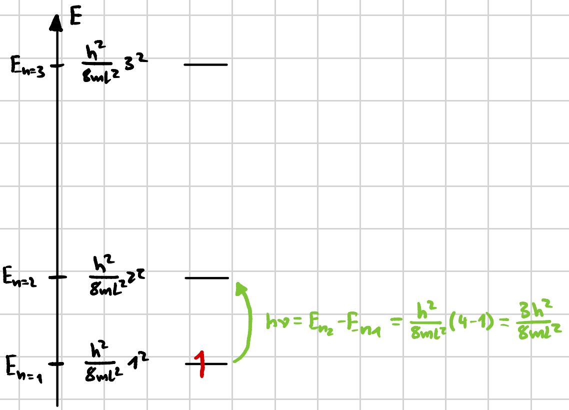
Um die Konstante $B \in \mathbb{R}$ herauszufinden nutzen wir die Normierungsbedingung, denn die Wellenfunktion im Betragsquadrat ist nach der Interpretation nach Born eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Folgedessen muss sie integriert über den ganzen Raum 1 ergeben.

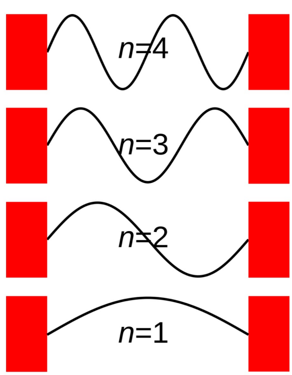
$$\int_\Omega \psi^*\psi\, d\tau \overset{!}{=} 1 \qquad \int_\Omega \psi^*\psi\, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2 dx = \int_0^L B^2\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = B^2\int_0^L \frac{1-\cos\left(2\frac{n\pi x}{L}\right)}{2}dx$$

$$\Rightarrow \frac{B^2}{2}\left[x - \sin\left(2\frac{n\pi x}{L}\right)\frac{L}{2n\pi}\right]_0^L = \frac{B^2}{2}\left(L - \sin\left(\frac{2n\pi \cancel{L}}{\cancel{L}}\right)\frac{L}{2\pi n} - \left(0 - \cancelto{0}{\sin(0)}\frac{L}{2\pi n}\right)\right) = \frac{B^2}{2}\left(L - \cancelto{0}{\sin(2\pi n)}\frac{L}{2\pi n}\right) = \frac{B^2L}{2}$$

$$\Rightarrow 1 \overset{!}{=} \frac{B^2L}{2} \Leftrightarrow B^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

Damit haben wir die Energieeigenwerte und die Wellenfunktion für das Teilchen im Kasten hergeleitet. Würde sich ein Elektron im Kasten befinden, so könnte es nur Energien von $E_n$ (Energieniveaus) annehmen




**Vorgehen bei QM-Problemen:**

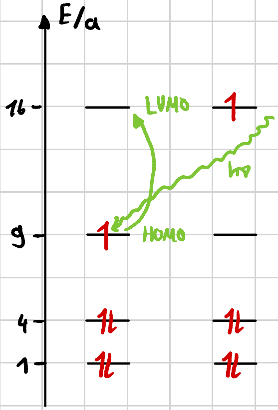
1. $\hat{H}$ bestimmen (vor allem $V$)
2. Schrödingergleichung aufstellen
3. Mit entsprechendem Ansatz lösen
4. Randbedingungen einsetzen (Quantisierung)
5. Normieren mit $\int |\psi(x)|^2\, dx = 1$
6. $\psi$ in die Schrödingergleichung einsetzen und $E$ bestimmen

1. Die Quantisierung eines Systems kommt durch das Erfüllen der Randbedingungen zustande. Eine Quantenzahl beschreibt einen Zustand des Systems.
2. Die Anzahl der verschiedenen Quantenzahlen entspricht der Dimension des Problems
3. Nullstellen der Wellenfunktion sind **Knoten**, wobei die Energie des Systemzustands mit steigender Knotenzahl zunimmt.
4. QM-Systeme haben oft eine **Nullpunktsenergie** ungleich null. Beim Teilchen im Kasten enspricht das

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$

① Es befinden sich 5 Elektronen in einem Kasten und sie interagieren nicht miteinander. Welche Wellenlänge hat dasjenige Licht, welches ein Elektron von HOMO ins LUMO anzuregen.

$$E_1 = \overbrace{\frac{h^2}{8mL^2}}^{a} \cdot 1^2 \qquad E_2 = \overbrace{\frac{h^2}{8mL^2}}^{a} \cdot 2^2 \qquad E_n = an^2$$




$$\Delta E = E_4 - E_3 = \frac{h^2}{8mL^2}(16-9) = \frac{7h^2}{8mL^2}$$

$$E_{ph} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{\cancel{h}c}{\lambda} = \frac{7h^{\cancel{2}}}{8mL^2} \Leftrightarrow \boxed{\lambda = \frac{8mL^2c}{7h}}$$

② Wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im linken Viertel des Kastens befindet?

Born: $$P_{[0,1/4L]} = \int_0^{1/4L} \psi^*\psi \, d\tau = \int_0^{1/4L} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^{1/4L} \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\cancel{2}}{L}\int_0^{1/4L} \frac{1-\cos\left(2\frac{n\pi x}{L}\right)}{\cancel{2}} dx = \frac{1}{L}\left[x - \sin\left(\frac{2\pi x n}{L}\right)\frac{L}{2n\pi}\right]_0^{1/4L}$$

$$= \frac{1}{L}\left(\frac{L}{4} - \sin\left(\frac{2n\pi}{\cancel{L}}\frac{\cancel{L}}{4}\right)\frac{L}{2n\pi} - \left(0 - \cancelto{0}{\sin(0)}\frac{L}{2n\pi}\right)\right) = \frac{1}{L}\left(\frac{L}{4} - \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right)$$

n = even: $\frac{1}{4}$

n = odd: $\frac{1}{L}\left(\frac{L}{4} - 1\right)$

③ Wo befinden sich für n = 4 die Knoten der Wellenfunktion?

Nullstellen von $\psi_{n=4}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \Rightarrow 0 = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right) \Rightarrow \frac{4\cancel{\pi}x}{L} = k\cancel{\pi} \Rightarrow x = \frac{kL}{4}$ $\quad k = 0,1,2,3,4$

$x = 0, \frac{L}{4}, \frac{L}{2}, \frac{3L}{4}, L$

④ Überprüfe, ob ψ eine Eigenfunktion des Impulsoperator $\hat{p}_x$ bzw. $\hat{p}^2$ ist.

$$\hat{p}_x \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right] = -i\hbar\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\cdot\frac{n\pi}{L} = -\frac{i\hbar n\pi\sqrt{2}}{\sqrt{L^3}}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \neq \lambda\psi(x)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx} \qquad \hat{p}_x^2 = \hat{p}_x\cdot\hat{p}_x = \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = (-i)^2\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$$

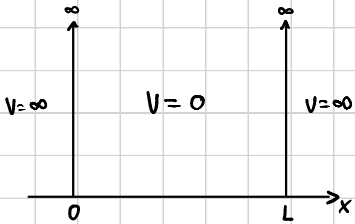
Eigenwertgleichung: $\hat{p}_x^2\psi = \lambda\psi$

$$\Rightarrow -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right] = -\hbar^2\cdot\sqrt{\frac{2}{L}}\cdot\frac{d}{dx}\left[\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]\cdot\frac{n\pi}{L}$$

$$= \hbar^2\sqrt{\frac{2}{L}}\cdot\frac{n^2\pi^2}{L^2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{L^2}\cdot\sqrt{\frac{2}{L}}\cdot\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$= \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{L^2}\cdot\psi(x)$$

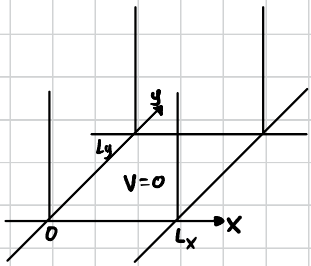
Für das Teilchen im 1D-Kasten hatten wir letzte Stunde folgendes hergeleitet:




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

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

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).

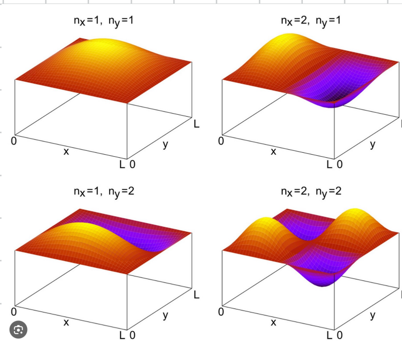
Wenn in der Quantenmechanik die Dimensionalität von nicht gekoppelten Systemen erhöht wird ist der Produktansatz sehr gut. Man geht davon aus, das eine Lösung des Problems gerade das Produkt der eindimensionalen Probleme ist.

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

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

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

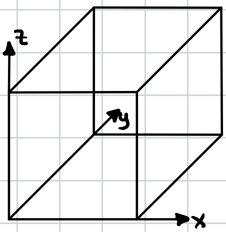
$$\psi(x,y) = X(x)\cdot Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\cdot\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) \qquad E_{n_x,n_y} = \frac{h^2 n_x^2}{8mL_x^2} + \frac{h^2 n_y^2}{8mL_y^2} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$




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)

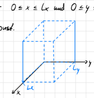
Wir wollen im Folgenden die Eigenschaften von Neutronen in einem zweidimensionalen Kasten untersuchen.

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

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




$V(x,y)$: 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.

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

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

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

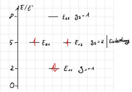
2.c Bestimmen Sie die vier energetisch tiefsten Zustände und stellen Sie diese in einem Energieniveaudiagramm für die Fälle (i) $L_x = L_y$ und (ii) $L_x = \sqrt{2}L_y$ graphisch dar. Achten Sie auf korrekte Achsenbeschriftungen. Gibt es entartete Zustände? Wenn ja, geben Sie die entsprechenden Entartungsfaktoren 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: $E_{11}, E_{12}, E_{21}, E_{22}$

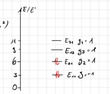



ii) $L_x = \sqrt{2}L_y = L \iff L_y^2 = \frac{L^2}{2}$

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

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

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