

Zweidimensionale QM – das Teilchen im Topf

1 Wellenfunktion, Potential und Schrödinger-Gleichung im \mathbb{R}^2

Ort $x \rightarrow (x, y)$: Punkt P im zweidimensionalen Raum $\mathbb{R}^2 \Rightarrow$ Koordinatentripel (x, y) gibt an, wie weit vom Ursprung aus in x - und in y -Richtung, um zu P zu gelangen.

Potential $V(x) \rightarrow V(x, y)$: Zu jedem Ort (x, y) gehört eine potentielle Energie $V(x, y, z)$.

Wellenfunktion $\Psi(x, t) \rightarrow \Psi(x, y, t)$: Auch Wellenfunktion Ψ ist zweidimensional, hängt nun also von drei Variablen x, y und t ab. $|\Psi(x, y, t)|^2$ beschreibt zu jedem Zeitpunkt t die Wahrscheinlichkeitsdichte resp. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort (x, y) . Genauer:

$$\begin{aligned}\text{Wahrsch. das Tl. zur Zeit } t \text{ innerhalb der Fläche } A \text{ zu finden} &= \int_A |\Psi(x, y, t)|^2 dA \\ &= \int_{y_1}^{y_2} \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, y, t)|^2 dx dy\end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung für $\Psi(x, y, t)$: Gleichung muss auf zwei Dimensionen erweitert werden. Nicht weiter schwierig! Sieht wie folgt aus:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \quad \longrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) + V \Psi$$

Es kommt lediglich die partielle zweite Ableitung nach y hinzu!

Unter Verwendung des **Laplace-Operators** $\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ schreiben wir kürzer:

$$\text{Zweidimensionale Schrödinger-Gleichung:} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi \quad (1)$$

2 Variablenseparation wie gehabt!

Stationäres Potential: Das Potential sei **zeitunabhängig**, also $V = V(x, y)$.

Separationsansatz: Wir gehen zunächst von **separierbaren Lösungen** aus:

$$\Psi(x, y, t) = \varphi(t) \cdot \psi(x, y) \quad (2)$$

Wellenfunktion $\Psi(x, y, t)$ ist Produkt aus nur vom Ort (x, y) abhängigen Anteil $\psi(x, y)$ und nur von der Zeit t abhängigen Anteil $\varphi(t)$.

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung: Bearbeite Schrödinger-Gleichung mittels Separationsansatz:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi \quad \Rightarrow \quad i\hbar \psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi \Delta \psi + V \psi \varphi$$

Division durch $\Psi = \varphi \psi$ ergibt:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \Delta \psi + V \stackrel{!}{=} E$$

Da die linke Seite $i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt}$ nur von t und die rechte Seite $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \Delta \psi + V$ nur von (x, y) abhängig ist, müssen beide Seiten konstant sein, sonst können sie unmöglich für beliebige Werte von t resp. von (x, y) stets übereinstimmen! \Rightarrow zwei Gleichungen zur **Separationskonstante** E :

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E \quad \text{und} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \Delta \psi + V = E$$

Lösung der Zeitgleichung: Differentialgleichung für zeitabhängigen Anteil $\varphi(t)$ ist rasch gelöst:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E \quad \Rightarrow \quad \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \quad \Rightarrow \quad \varphi(t) = A \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Praktisch: $|e^{i\alpha}| = 1 \Rightarrow$ setze $A = 1$ und überlasse damit die Normierung der Wellenfunktion $\Psi(x, y, t)$ dem ortsabhängigen Anteil $\psi(x, y)$.

Zeitkomponente der Wellenfunktion zu E : $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ (3)

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: Multipliziere zeitunabhängige Gleichung mit ψ :

3D zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = E\psi$ (4)

Notation mit Hamilton-Operator: Im zweidimensionalen ist der **Hamilton-Operator** \hat{H} (= Operator zur Gesamtenergie E des Teilchens) gegeben durch:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V$$

Damit lässt sich die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung verkürzt schreiben:

Kurzform zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: $\hat{H}\psi = E\psi$ (5)

\Rightarrow Separationskonstante E weist die Dimension einer Energie auf!

3 Das zweidimensionale Kastenpotential

“Im Topf eingesperrt”: Betrachte ein Teilchen in einer rechteckigen Fläche mit Länge L_x und Breite L_y . Die Wände seien “hart”, während sich das Teilchen im Innenraum frei bewegen kann. Das bedeutet, für das nicht von der Zeit t abhängige Potential V soll gelten:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L_x \text{ und } 0 < y < L_y \\ +\infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Zweite Variablenseparation: In obigen zwei Bedingungen für $V(x, y) = 0$ steckt die “Symmetrie” des Potentials. Die zwei Ortskoordinaten x und y sind bei der Überprüfung dieser Bedingungen separat zu betrachten. Sie sind in gewisser Weise voneinander unabhängig.

Dies legt folgende neuerliche Variablenseparation der örtlichen Wellenfunktion $\psi(x, y)$ nahe:

Zweite Variablenseparation: $\psi(x, y) = F(x) \cdot G(y)$ (6)

Wir gehen also davon aus, dass sich $\psi(x, y)$ als Produkt zweier voneinander unabhängiger Funktion $F(x)$ und $G(y)$ schreiben lässt, die je nur von einer einzigen Ortskoordinate abhängen.

Anwendung: Wir setzen diesen zweiten Separationsansatz (6) in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (4) ein ($V = 0$ im Innern des Topfs):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(G \frac{d^2 F}{dx^2} + F \frac{d^2 G}{dy^2} \right) \stackrel{!}{=} E \cdot FG = E\psi$$

Division durch $\psi = FG$ ergibt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{F} \frac{d^2 F}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{G} \frac{d^2 G}{dy^2} = E$$

Neue Energie-Separationskonstanten: Jedes der zwei Glieder auf der linken Gleichungsseite hängt nur von einer der beiden Ortskoordinaten x und y ab. Diese sind aber unabhängig voneinander variabel. Trotzdem muss sich auf der rechten Seite ein konstanter Wert E ergeben. Das kann nur bedeuten, dass jedes Glied auf der linken Gleichungsseite für sich alleine konstant ist. Es ergeben sich somit zwei neue Energie-Separationskonstanten E_x und E_y :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{F} \frac{d^2 F}{dx^2} = E_x \quad \text{und} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{G} \frac{d^2 G}{dy^2} = E_y$$

Nun ist die Gesamtenergie E des Zustandes die Summe aus zwei Teilenergien, die je zu einer Raumrichtung gehören:

$$E_x + E_y = E \quad (7)$$

Interpretation: Da es im Innern des Topfs keine potentielle Energie gibt ($V = 0$), setzt sich die Gesamtenergie E aus den zwei kinetischen Energien in den verschiedenen Raumrichtungen zusammen.

Neue Gleichungen: Aus der zeitunabhängigen, zweidimensionalen Schrödinger-Gleichung erhalten wir also zwei Differentialgleichungen, eine für jede der beiden Raumrichtungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F}{dx^2} = E_x F \quad \text{und} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 G}{dy^2} = E_y G \quad (8)$$

Die Strukturen sind identisch! \Rightarrow Wir brauchen nur eine Gleichung zu lösen. Die Lösung der anderen Gleichung sieht gleich aus.

Lösung in einer Raumdimension: Betrachte x -Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F}{dx^2} = E_x F \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 F}{dx^2} = -k_x^2 F \quad \text{mit} \quad k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}$$

Lineare, homogene Differentialgleichung 2. Ordnung! Lösungsansatz ist uns bestens vertraut:

$$\begin{aligned} F(x) &= C_x \sin(k_x x) + D_x \cos(k_x x) \quad \Rightarrow \quad \frac{dF}{dx} = k_x C_x \cos(k_x x) - k_x D_x \sin(k_x x) \\ &\Rightarrow \quad \frac{d^2 F}{dx^2} = -k_x^2 C_x \sin(k_x x) - k_x^2 D_x \cos(k_x x) = -k_x^2 F(x) \end{aligned}$$

Ansatz erfüllt offensichtlich die Differentialgleichung!

Zusätzlich gelten **Randbedingungen:** $F(x)$ und $\frac{dF}{dx}$ müssen bei $x = 0$ und $x = L_x$ stetig sein. Da $F(x)$ für $x \notin [0; L_x]$ verschwindet, folgt:

$$\begin{aligned} F(0) &= C_x \sin(k_x \cdot 0) + D_x \cos(k_x \cdot 0) = D_x \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad D_x = 0 \\ F(L_x) &= C_x \sin(k_x L_x) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad k_x L_x = n_x \pi \quad \text{mit} \quad n_x \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

Zusammen folgt:

$$F(x) = C_x \sin(k_x x) \quad \text{mit} \quad k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \quad \text{und} \quad n_x \in \mathbb{N} \quad (9)$$

Die **Normierungskonstante** C_x ist bis dato nicht näher bestimmt. Die Normierung erfolgt im nächsten Abschnitt. Für die zugehörige Energie ergibt sich nun aber bereits:

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{n_x \pi}{L_x}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n_x^2 \pi^2}{2m L_x^2} \quad (10)$$

Zweidimensionale zeitunabhängige Wellenfunktion $\psi(x, y)$: Analoge Lösungen in der anderen Raumrichtung y . Zusammen ergibt sich:

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = F(x) \cdot G(y) = C_x \sin(k_x x) \cdot C_y \sin(k_y y)$$

$$\text{mit} \quad k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L_y} \quad \text{mit} \quad n_x, n_y \in \mathbb{N}$$

Die beiden Normierungskonstanten lassen sich zu einer einzigen zusammennehmen ($C = C_x C_y$):

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = C \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

In der Fläche befindet sich genau ein Teilchen \Rightarrow Normierung von $\psi_{n_x, n_y}(x, y)$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} |\psi_{n_x, n_y}(x, y)|^2 dA &= \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} |C|^2 \sin^2(k_x x) \sin^2(k_y y) dy dx \\ &= |C|^2 \cdot \int_0^{L_x} \sin^2(k_x x) dx \cdot \int_0^{L_y} \sin^2(k_y y) dy \\ &= |C|^2 \cdot \frac{L_x}{2} \cdot \frac{L_y}{2} = |C|^2 \cdot \frac{A}{4} \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{4}{A}} \quad (\text{reell}) \end{aligned}$$

Alles zusammen: Gesamte örtliche Wellenfunktion:

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{A}} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \quad (11)$$

Resp. vollständige, separierbare, normierte Lösung der Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \Psi_{n_x, n_y}(x, y, t) &= \psi_{n_x, n_y}(x, y) \cdot e^{-iE_{n_x, n_y} t / \hbar} \\ &= \sqrt{\frac{4}{A}} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cdot e^{-iE_{n_x, n_y} t / \hbar} \end{aligned}$$

Dabei gilt für die zugehörige Gesamtenergie gemäß (10):

$$E_{n_x, n_y} = E_x + E_y = \frac{\hbar^2 n_x^2 \pi^2}{2m L_x^2} + \frac{\hbar^2 n_y^2 \pi^2}{2m L_y^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \quad (12)$$

4 Repetition: Stationäre Zustände

Lösungen $\Psi_{n_x, n_y}(x, y, t)$ stehen für **stationäre Zustände** – mit all ihren wichtigen Eigenschaften:

Konstante Erwartungswerte: Befindet sich ein Teilchen im Zustand $\Psi_{n_x, n_y}(x, y, t)$, so sind die Erwartungswerte $\langle Q \rangle$ sämtlicher physikalischen Größen Q zeitlich konstant:

$$\langle Q \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} \Psi_{n_x, n_y}^* \hat{Q} \Psi_{n_x, n_y} dA = \int_{\mathbb{R}^2} \psi_{n_x, n_y}^* \hat{Q} \psi_{n_x, n_y} dA = \text{konst.} \quad (13)$$

Scharfer Energiewert: Zum Zustand $\Psi_{n_x, n_y}(x, y, t)$ gehört eine ganz bestimmte, scharfe Energie E_{n_x, n_y} . Eine Messung der Gesamtenergie eines Teilchens in diesem Zustand ergibt genau diesen Wert (keine Unbestimmtheit mehr).

Vollständigkeit: Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (1) ist eine **Linearkombination** der separierbaren Lösungen mit Koeffizienten c_{n_x, n_y} :

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{n_x, n_y} c_{n_x, n_y} \Psi_{n_x, n_y}(x, y, t) = \sum_{n_x, n_y} c_{n_x, n_y} \psi_{n_x, n_y}(x, y) \cdot e^{-iE_{n_x, n_y} t / \hbar}$$

mit $\sum_{n_x, n_y} |c_{n_x, n_y}|^2 = 1$

Orthonormalität: Für je zwei örtliche Anteile $\psi_{n_{x,1}, n_{y,1}}(x, y)$ und $\psi_{n_{x,2}, n_{y,2}}(x, y)$ von separierbaren Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^2} \psi_{n_{x,1}, n_{y,1}}^* \psi_{n_{x,2}, n_{y,2}} dA = \delta_{n_{x,1} n_{x,2}} \delta_{n_{y,1} n_{y,2}} = \begin{cases} 1 & \text{für } n_{x,1} = n_{x,2} \text{ und } n_{y,1} = n_{y,2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

5 Das Energiespektrum des Topfpotentials

Welche Energiewerte kann nun ein Teilchen im unendlich tiefen zweidimensionalen Potentialtopf aufweisen?

Zur Veranschaulichung dieser Frage betrachten wir einen Topf, bei dem die Abmessungen L_x und L_y fast, aber nicht ganz genau gleich groß sind. Diese Längen seien gerade so gewählt, dass die niedrigsten Energien in den zwei Raumrichtungen $E_{x,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} = 1 \text{ eV}$ und $E_{y,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} = 1.2 \text{ eV}$ betragen. Der rechteckige Topf ist also in x -Richtung etwas länger als in y -Richtung, denn $E \sim \frac{1}{L^2}$.

Nun kann das Zahlenpaar (n_x, n_y) jede Kombination in \mathbb{N}^2 annehmen. Die zugehörige Gesamtenergie ist gemäß (12) jeweils gegeben durch:

$$E = n_x^2 \cdot E_{x,1} + n_y^2 \cdot E_{y,1} = (1.0 n_x^2 + 1.2 n_y^2) \text{ eV} \quad (14)$$

Dies spannt das **Energiespektrum** des Teilchens im unendlich tiefen Potentialtopf auf, wie die Grafik auf der nächsten Seite illustriert. Zu jedem Paar (n_x, n_y) gehört ein ganz bestimmtes **Energieniveau**.

Da die Energien $E_{x,1} = 1 \text{ eV}$ und $E_{y,1} = 1.2 \text{ eV}$ nahe beieinander liegen, überrascht es nicht, dass wir in diesem **Energiespektrum** anfänglich ein Paar von nahe beieinander liegenden Energieniveaus finden, z.B. für $(n_x, n_y) = (2, 1)$ und $(1, 2)$. Beim $(3, 1)$ und $(1, 3)$ sind die Abstände schon größer, weil der Unterschied zwischen 1^2 und 3^2 deutlich größer ist als derjenige zwischen 1^2 und 2^2 .

Außerdem wird mit zunehmender Energie diese Paarstruktur immer weniger sichtbar. Dies ist so, weil die Dichte der Kombinationen und somit der Energiewerte zu, sodass sich Paare zu überlappen beginnen und die Unterscheidung schwer fällt.

n_x	n_y	Energie (eV)
1	1	2.2
2	1	5.2
1	2	5.8
2	2	8.8
3	1	10.2
1	3	11.8
3	2	13.8
2	3	14.8
3	3	19.8
4	1	17.2
1	4	20.2
4	2	20.8
2	4	23.2
4	3	26.8
3	4	28.2
4	4	35.2
5	1	26.2
1	5	31.0
5	2	29.8
2	5	34.0
5	3	35.8
3	5	39.0
5	4	44.2
4	5	46.0
5	5	55.0

