

8. Grundlagen der Quantenmechanik

Erfolge des Bohr-Modells:

- Erklärung grundlegender Eigenschaften des Spektrums des Wasserstoff-Atoms unter Annahme der Existenz von Materiewellen
- erklärt auch Wasserstoff-ähnliche Einelektron-Atome

Bohr-Modell reicht nicht aus zur Erklärung:

- der Einzelheiten des Spektrums des Wasserstoff-Atoms
 - relative Intensitäten von Spektrallinien
 - Aufspaltung der Spektrallinien in elektrischen/magnetischen Feldern
- von einfachen Mehrelektron-Atomen (z.B. Helium: 2 Elektronen ein Kern)
- der Struktur des periodischen Systems der Elemente
- der Bindung zwischen einzelnen Atomen
- der physikalischen oder chemischen Eigenschaften von einzelnen Atomen

1925-26: Entwicklung der Quantenmechanik

- Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born, Paul Dirac und andere entwickeln einen weiterführenden Ansatz um die Eigenschaften von mikroskopischen Systemen (z.B. Atomen) zu erklären: Die Quantenmechanik.
- **Ziel:** Entwicklung einer Theorie, die die Welleneigenschaften von Teilchen korrekt beschreibt:

schon bis in die 1930er Jahre:

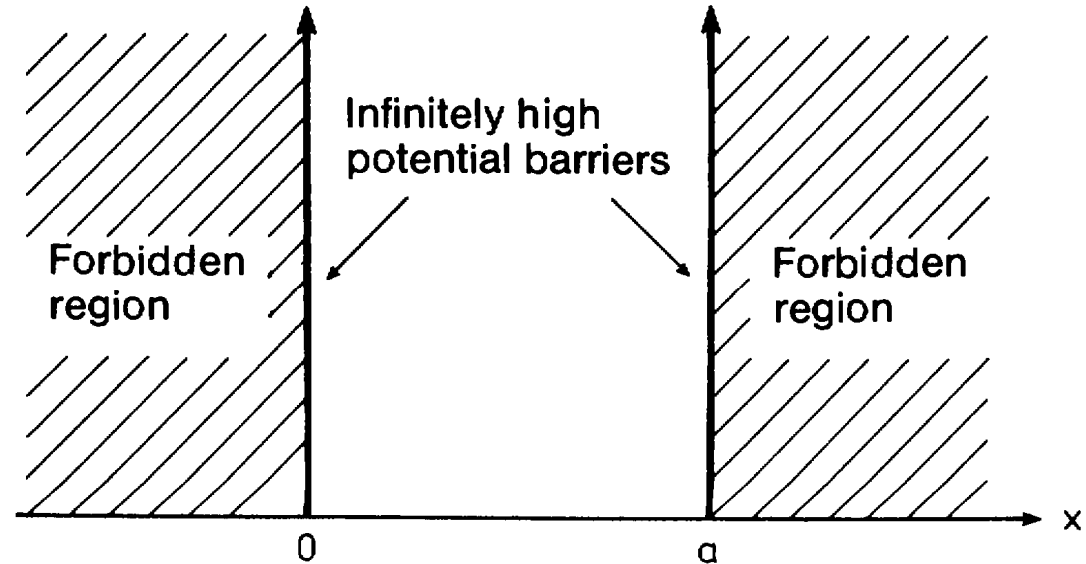
- eine grosse Anzahl von Beobachtungen und Experimenten in der Physik und der Chemie können mit Hilfe der Quantenmechanik erklärt werden
- bis heute hat noch kein Experiment den Vorhersagen der Quantenmechanik widersprochen
- die Quantenmechanik ist eine der erfolgreichsten Theorien überhaupt

8.1 Teilchen in einem Potentialtopf

ein weiteres Beispiel zur Lösung eines quantenmechanischen Problems mit dem Postulat der Materiewellen

- betrachte ein einzelnes Teilchen (z.B. ein Elektron) in einem 1D Potentialtopf

- die Bewegung des Teilchens entlang der x -Richtung ist durch harte Wände in den Positionen $x = 0$ und $x = a$ eingeschränkt
- diese Tatsache wird durch eine Potential U mit $U = 0$ für $0 < x < a$ und $U = \infty$ an allen übrigen Orten beschrieben
- betrachte Teilchen als Materiewelle



- für freies Teilchen:

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$E = \hbar \omega = \hbar \nu$$

de Broglie

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

klassische Beziehung zwischen Energie und Impuls

$$E = p^2 / 2m_0 \quad \Rightarrow \quad p = \pm \sqrt{2m_0 E}$$

- mögliche dem Impuls p zugeordnete Werte des Wellenvektors k

$$k = \frac{p}{\hbar} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0 E}$$

- stehende Welle als Superposition zweier Materiewellen

$$\Psi(x,t) = (C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}) e^{-i\omega t}$$

$$= \psi(x) e^{-i\omega t}$$

- Randbedingungen für Materiewelle im Potentialtopf

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow C_1 + C_2 = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = 2i C_1 \sin(kx)$$

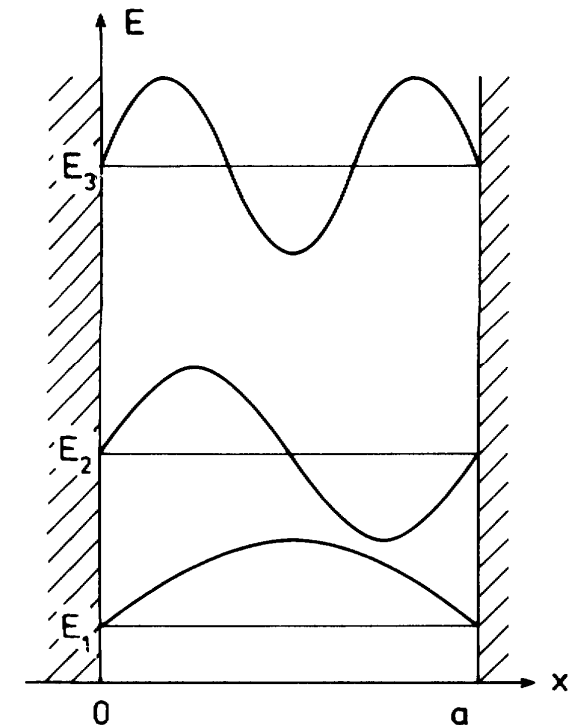
$$\psi(a) = 0 \Rightarrow \sin ka = 0$$

$$\Rightarrow k = n \frac{\pi}{a}$$

- Energie des Teilchens mit dieser Quantisierungsbedingung:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(n \frac{\pi}{a} \right)^2$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$



Bestimmung der Konstanten C_1 :

- Normierungsbedingung:

$$\int \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$
$$\Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

- zur Quantenzahl n gehörende Wellenfunktion:

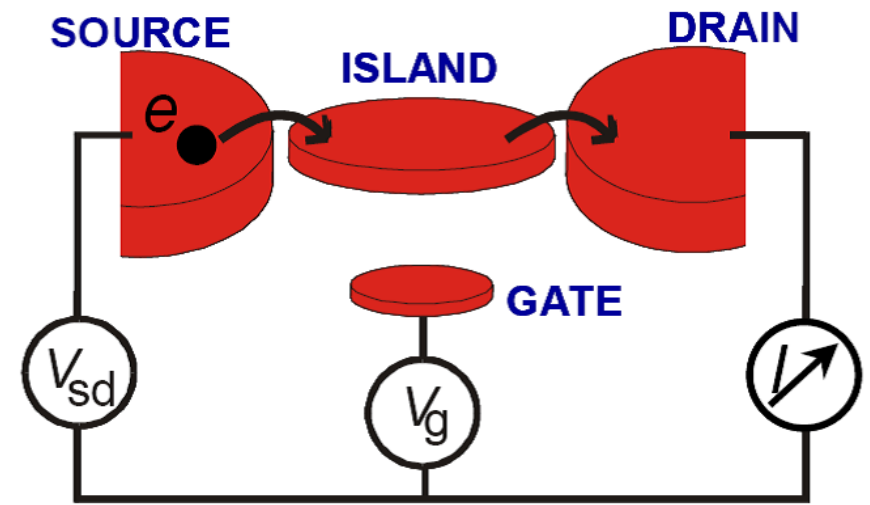
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} i \sin\left(n x \frac{\pi}{a}\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2a}} \left(e^{i \frac{n\pi}{a} x} - e^{-i \frac{n\pi}{a} x} \right)$$
$$\begin{array}{ccc} \uparrow & & \uparrow \\ k = \frac{n\pi}{a} & & k = -\frac{n\pi}{a} \end{array}$$

Überlagerung zweier k -Vektoren mit unterschiedlichem Vorzeichen also zweier Impulse p mit unterschiedlicher Richtung

Quantenpunkte

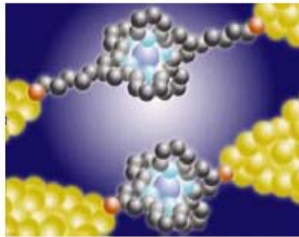
Aufbau:

- kleine metallische oder halbleitende Insel für Elektronen
- diskrete Elektron-Energieniveaus
- Kopplung an Elektronen-Quelle (source) oder Senke (drain) durch Tunnelkontakte
- Kopplung an Gatter-Elektrode zur Einstellung der Anzahl Elektronen

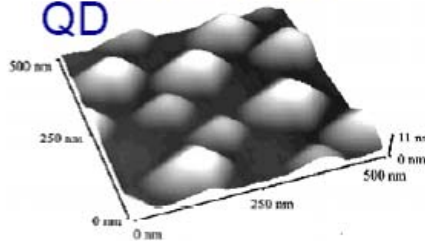


verschiedene physikalische Realisierungen von Quantenpunkten:

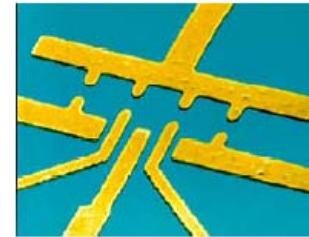
single molecule



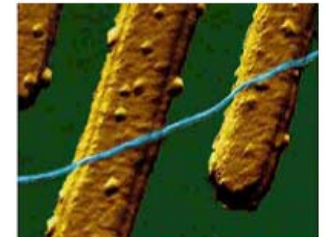
self-assembled QD



lateral QD



nanotube

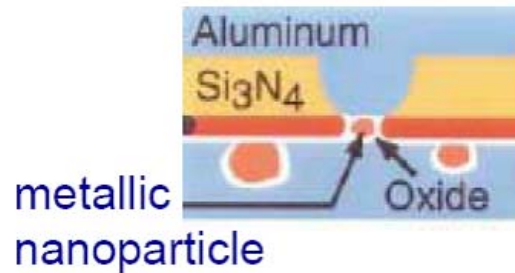


1 nm

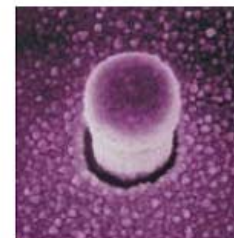
10 nm

100 nm

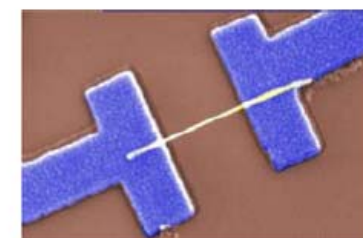
1 μm



metallic nanoparticle



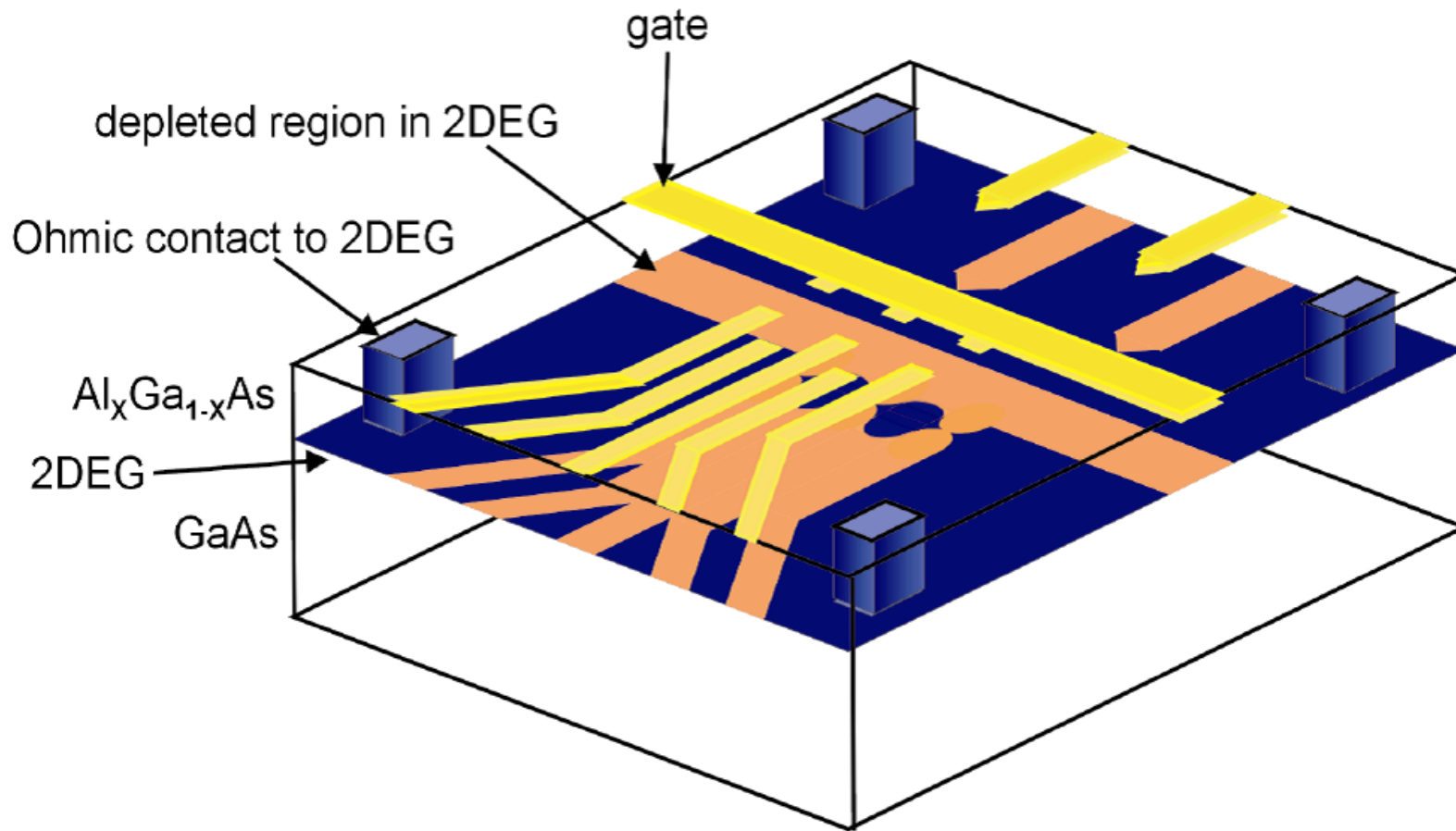
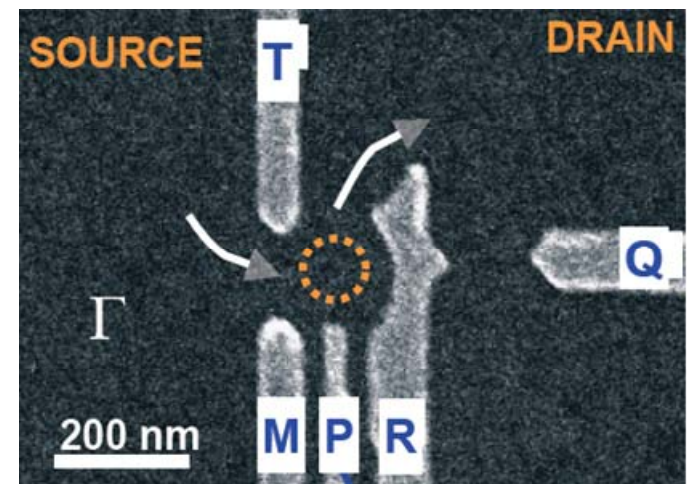
vertical QD



nanowire

Elektrostatisch definierte Quantenpunkte in zweidimensionalen Elektronengasen (2DEG)

- Isolierung einzelner Elektronen auf einem Chip
- elektrische Kontrolle einzelner Elektronen
- elektrische Messung einzelner Elektronen



8.2 Die Wellenfunktion

- allgemeine Einführung einer komplexen Wellenfunktion ψ zur Beschreibung der quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens

$$\psi = A + iB \quad i = \sqrt{-1}, \quad i^2 = -1$$

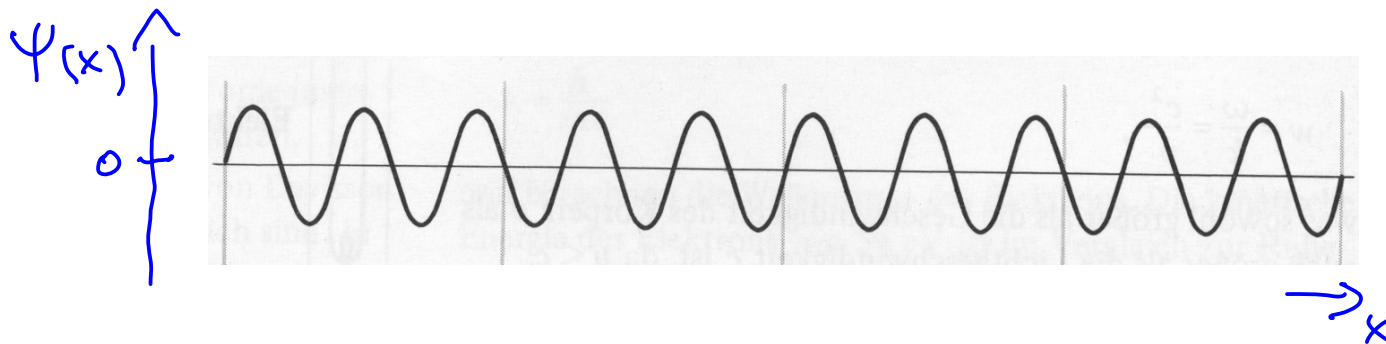
- Das Quadrat des Betrags von ψ ausgewertet an einer gegebenen Koordinate x ist proportional zur **Wahrscheinlichkeitsdichte** P das Teilchen an dem Ort x zur Zeit t zu finden

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = (A + iB)(A - iB) = A^2 + B^2 = \rho$$

- ψ^* ist die zu ψ komplex konjugierte Wellenfunktion

$$\psi^* = A - iB$$

- ebene Welle



Eigenschaften der Wellenfunktion ψ

- **Normierung der Wellenfunktion:** Für ein Teilchen mit gültiger Wellenfunktion ψ und Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ muss die Gesamtwahrscheinlichkeit das Teilchen an einem beliebigen Ort im Raum zu finden gerade gleich 1 sein. Dann ist die Wellenfunktion normiert.

$$\int |\psi|^2 dV = \int \rho dV = P = 1$$

- die Wellenfunktion ψ ist **eindeutig** und **stetig**
- die Ableitungen der Wellenfunktion ψ sind ebenfalls **eindeutig** und **stetig**

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

- **räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit** eines Teilchens (in einer Dimension):

$$P_{x_1, x_2} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx$$

- Wellenpaket

