

2.3.4 Merkpunkte zu Kapitel 2.3 "Essenz der Quantentheorie"

Für alle Rechnungen sieht das Schema so aus:

- "Input" ist das Potential $U(\mathbf{r})$.
- "Output" ist die komplexe *Wellenfunktion* $\psi(\mathbf{r})$ plus die zugehörige *Gesamtenergie* E .
- Die Verknüpfung von Input und Output leistet die *Schrödingergleichung*, rechts in Kurzform notiert (mit dem Skalarprodukt $\nabla \cdot \nabla =$ Summe der zweiten partiellen Ableitungen nach allen drei Ortskoordinaten).
- Das *Betragsquadrat* $\psi \cdot \psi^* \cdot dV$ gibt die *Wahrscheinlichkeit* an, das behandelte Teilchen im Volumenelement dV zu finden.

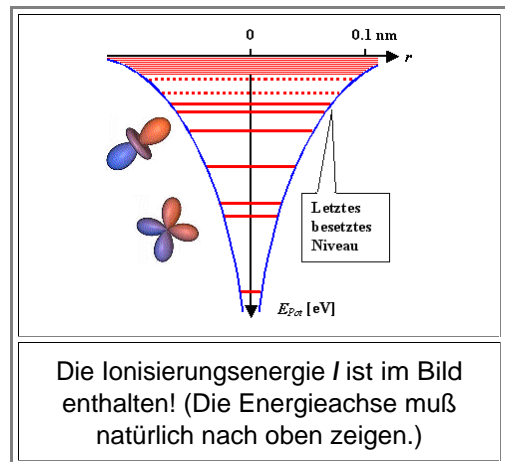
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla \psi + (U - E)\psi = 0$$

Im allgemeinen gibt es viele (meist ∞ viele) Lösungen, die mit Quantenzahlen n, m, \dots durchnummeriert werden.

- Eine der Lösungen = *ein* möglicher Zustand des *Systems*.
- Zu jedem Zustand $\psi_{n, m, \dots}$ gehört eine Energie $E_{n, m, \dots}$
- Verschiedene Zustände können *dieselbe* Energie haben. Die Energie ist dann bezüglich der zustandsbeschreibenden Quantenzahlen *entartet*.

Was man erhält, z. B. für ein Atom, kann wieder in einem Potentialtopfmodell visualisiert werden \Rightarrow

- Gezeigt sind zwei Wellenfunktionen = 2 Zustände mit zugehörigen E -Werten und weitere Energieniveaus ohne Wellenfunktionsbild.
- Welche Lösungen realisiert werden (= welche *Zustände mit Elektronen besetzt* werden), entscheidet
 - die Natur der betrachteten Teilchen sowie
 - die "Temperatur" oder die Einbettung in die "Umwelt" (in der Regel das Prinzip der Minimierung der Energie).



Die Ionisierungsenergie I ist im Bild enthalten! (Die Energieachse muß natürlich nach oben zeigen.)

Alle Teilchen haben auch Welleneigenschaften und können interferieren, im Extremfall mit sich selber (Doppelschlitzexperiment).

- Entscheidende Größen sind die Wellenlänge λ , der Wellenvektor \mathbf{k} und der Impuls \mathbf{p} .
- Sie sind durch die *de Broglie-Beziehung* gekoppelt.

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$$

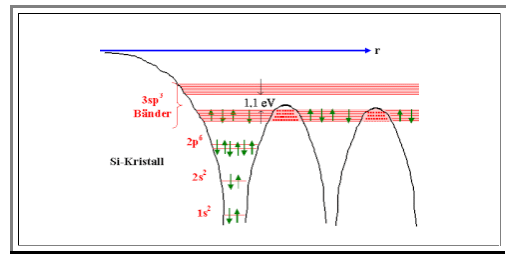
Es gibt zwei fundamentale Teilchensorten:

- *Bosonen*; mit ganzzahligem *Spin* ($s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$); z. B. Photonen: $s = \pm 1$
- *Fermionen*; mit halbzahligem *Spin* ($s = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$); z. B. Elektronen, Protonen, Neutronen: $s = \pm 1/2$
- Für Fermionen (und *nur* für Fermionen) gilt das unglaublich wichtige *Pauli-Prinzip* \Rightarrow

Elektronen in einem System können *nie* denselben Zustand einnehmen

Wichtig ist, was passiert, wenn man aus einzelnen Potentialtöpfen für Elektronen einen Kristall macht – durch **Überlappung der Einzeltöpfe**.

- Das Pauli-Prinzip **erzwingt** die Aufspaltung von überlappenden Einzelniveaus in **Bänder** (bei gleichzeitiger Energieabsenkung; sonst tritt keine Bindung auf).
- Wie diese Bänder genau aussehen, d.h. wieviele Plätze (= Zustände) sie Elektronen bei der Energie **E** bieten, entscheidet über die wesentlichen **elektronischen Eigenschaften** des Materials (Leiter, Halbleiter, Isolator, ...).



Aufgaben:

- Diese beiden Aufgaben sind sehr lehrreich. ⇒ Man sollte sie zumindest nachvollziehen!

Fragebogen
Einfache Fragen zu 2.3

Übungsaufgabe
Aufgabe 2.3-1

Übungsaufgabe
Aufgabe 2.3-2

Hier noch ein "Multiple Choice"-Test, der zwar etwas über den Stoff hinausgeht, aber man kann es ja mal probieren!

Fragebogen
"Multiple Choice"-Fragen zu 2.3