

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.

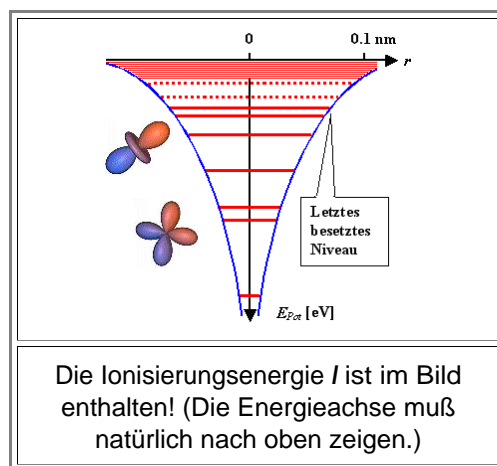
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla \psi + (U - E)\psi = 0$$

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).



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.

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

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

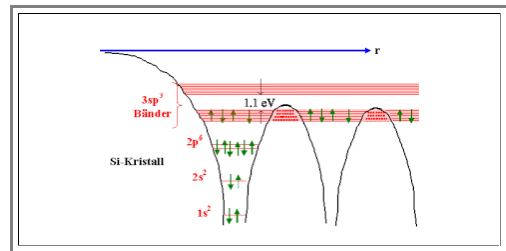
Es gibt zwei fundamentale Teilchensorten:

- *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