6. Wo stehen wir?

- Schrödingergleichung als Wellengleichung für deterministische Bewegg. einer Welle $\Psi(\vec{r},t)$:

bisher: freier Raum $\longrightarrow$ heute:

$$i\hbar\,\partial_t \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\Psi(\vec{r},t) + \text{Kräfte}$$

- Bornsche Interpretation:

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\vec{r},t)|^2$

bei Ausführung vieler Messungen $\longrightarrow$ nicht deterministisch

a) Mittlung d. Aufenthaltsorts

$$\langle \vec{r} \rangle = \int d^3r\, \Psi^*(\vec{r},t)\, \vec{r}\, \Psi(\vec{r},t)$$

b) suche weitere Mittelwerte

$$\langle F(\vec{r},\vec{p}) \rangle \overset{?}{=} \int d^3r\, \Psi^*(\vec{r},t)\, F(\vec{r},\vec{p})\, \Psi(\vec{r},t)$$

- Formulierung f. $F(\vec{r},\vec{p} = ?)$ $\longrightarrow$ Operatorbegriff
- Einwirkung v. Potentialgrößen auf Ψ
- Theorie der Messung $\longrightarrow$ hermitesche Operatoren (II)

7. Einfache Operatoren im Ortsraum

Ziel $\langle F(\vec{r},\vec{p})\rangle = ?$ im Ortsraum berechnen

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, \Psi^*(\vec{p},t)\, \vec{p}\, \Psi(\vec{p},t)$$ in symmetrischer Schreibweise

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r\, e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}\, \Psi^*(\vec{r},t)\, \underbrace{\vec{p} \int d^3r'\, e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}}\, \Psi(\vec{r}',t)}_{*}$$

$$* = \int d^3r' \left(-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{r'} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}}\right)\psi(\vec{r}',t)$$

$$= \underbrace{-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{r'}\left(e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}}\psi(\vec{r}',t)\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0,\ \text{wegen Integrierbarkeit}} + \int d^3r' \left[\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{r'}\psi(\vec{r}',t)\right] e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}}$$

$$\langle\vec{p}\rangle = \int d^3r \int d^3r'\, \psi^*(\vec{r},t)\, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{r'}\, \psi(\vec{r}',t) \underbrace{\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar}}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}')}$$

$$\boxed{\langle\vec{p}\rangle = \int d^3r\, \psi^*(\vec{r},t)\, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r\, \psi(\vec{r},t)}$$ Erwartungswert d. Impulses im Ortsraum

Interpretation: $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ „Impulsoperator" im Ortsraum

Operator: weil $\vec{\nabla}_r$ wirkt auf $\psi(\vec{r},t)$

Operatorschema der QM: $\vec{p} \longrightarrow \underline{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

klassisch Operator

7.2. Weg zum Hamiltonoperator

$F(\vec{r},\vec{p})$ definieren

a) Impuls: $\vec{p} \rightarrow \underline{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ „Impulsoperator"

b) Ort: $\vec{r} \rightarrow \underline{\vec{r}} = \vec{r}$ „Ortsoperator"

c) kinetische Energie: $E_{kin} = \frac{\underline{\vec{p}}^2}{2m} \rightarrow \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\,\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}}{2m} = \frac{-\hbar^2\Delta}{2m}$

$\Rightarrow \quad \underline{T} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$ Operator der kinetischen Energie

$\underline{T}$ bestimmt die rechte Seite der Schrödingergleichung

$i\hbar \partial_t \Psi = \underline{T} \Psi \quad \rightarrow$ Mgl. der Verallgemeinerung durch Potential V

d) Hamiltonfunktion

$$H = T + V \quad \rightarrow \quad \underline{H} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \underline{V}(\vec{\underline{r}}, \vec{\underline{p}}, t)$$ Hamiltonoperator $\underline{H}$

e) Schrödingergleichung f. Teilchen im Potential mit $\underline{H} = \underline{T} + \underline{V}$

$$\boxed{i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r},t) = \underline{H}(\vec{r}, \vec{\underline{p}}, t)\, \Psi(\vec{r},t)}$$

Interpretation: „$i\hbar\partial_t$" Energieoperator

f) Beispiele f. Hamiltonoperatoren:

i) freies Teilchen $\underline{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$

ii) Teilchen in Potentiallandschaft: $\underline{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + \underline{V}(\vec{r},t)$

iii) Teilchen in elektromagnetischem Feld: $\vec{A}, \phi$, Ladung q

$$H = \frac{\left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2}{2m} + q\,\phi(\vec{r},t)$$

$$\underline{H} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2}{2m} + q\,\phi(\vec{r},t)$$

iv) Vielteilchenproblem mit Coulombwechselwirkung: (i … N Teilchen)

$$\underline{H} = \sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_i} + \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{ij}\frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

8 Dynamik der Wellenfunktion in Potentialen

$$i\hbar\, \partial_t\, \Psi(\vec{r},t) = \underline{H}\, \Psi(\vec{r},t)$$

$$\underline{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + \underline{V}(\vec{r}, \underline{\vec{p}}, t)$$

Anwendungen: a/ stationäre Potentiale $V(\vec{r})$: Atom – Coulombkernpotential

Tunneleffekt, Alphazerfall

Einfang v. Teilch. in Halbleiterpotentiale

b/ nichtstationäre Potentiale : $V(\vec{r}, \vec{p}, t)$: Lichtabsorption

Lichtemission

Rabioszillationen

c/ Dissipation durch System – Bad WW, durch $\underline{V}$ beschreiben

8.1 Stationäre Potentiale

$$\underline{V}(\vec{r}, t, \vec{p}) \to V_0(\vec{r})$$

$$i\hbar\, \partial_t\, \Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\Delta \hbar^2}{2m} + V(\vec{r})\right] \Psi(\vec{r},t)$$

Ansatz: Separationsansatz : $\Psi(\vec{r},t) = f(t)\,\varphi(\vec{r})$

$$\left[i\hbar\, \partial_t f(t)\right] \varphi(\vec{r}) = \underline{H}(\vec{r},\vec{p})\, f(t)\, \varphi(\vec{r})$$

$$\curvearrowright \quad \underbrace{\frac{i\hbar \dot{f}(t)}{f(t)}}_{\substack{\text{nur von } t \\ \text{abhängig!} \\ (*)}} = \underbrace{\frac{\left[\underline{H}\, \varphi(\vec{r})\right]}{\varphi(\vec{r})}}_{\substack{\text{nur von } \vec{r} \\ \text{abhängig!} \\ (**)}} = \underbrace{\text{konst}}_{\substack{\text{nicht von } \vec{r} \text{ und } t \\ \text{abhängig!}}} = E \quad \text{Separationskonstante}$$

Bemerkungen:

a) $i\hbar\, \partial_t f(t) = f(t)\, E \longrightarrow f(t) = f_0\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ $\quad (*)$

$$\boxed{\underline{H}\, \varphi(\vec{r}) = E\, \varphi(\vec{r})\,, \quad \underline{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r})} \qquad (**)$$

Zeitunabhängige / stationäre Schrödingergleichung

$\hat{=}$ Eigenwertproblem mit Eigenwert E und Eigenfunktion φ:

i) es existieren eine Vielzahl v. Lösungen, typischerweise ∞ viele: $\boxed{\underline{H}\, \varphi_n = E_n\, \varphi_n}$

Jedes n nummeriert die Lösungen „n": Quantenzahlen

ii) Vorgriff auf Eigenschaften von φ_n, E_n:

- Eigenwerte E_n werden reell sein $\longrightarrow$ mgl. Messwerte der Energie

- $\{\varphi_n\}$ vollständiges, orthonormierbares Funktionensystem

vollständig: $\sum_n \varphi_n^*(\vec{r})\, \varphi_n(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$

orthonormierbar: $\int d^3r\, \varphi_n^*(\vec{r})\, \varphi_m(\vec{r}) = \delta_{nm}$

b) Zustände $\Psi(\vec{r},t) = \varphi_n(\vec{r})\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ sind Lsg. der Schrödingergl.

„stationäre Zustände" $\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi_n(\vec{r})|^2 \neq \cancel{f(t)}$

c) Interpretation von E_n:

$$\underline{H}\, \varphi_n = E_n\, \varphi_n \quad \Big| \cdot \varphi_n^*(\vec{r}),\ \int d^3r$$

$$\underbrace{\int d^3r\, \varphi_n^*(\vec r)\, \underline{H}\, \varphi_n(\vec r)}_{\text{Erwartungswert d. Energie}} = E_n \underbrace{\int d^3r\, \varphi_n^*(\vec r)\, \varphi_n(\vec r)}_{1}$$

E_n ist die Energie d. stationären Zustands.

d) Gesamtlösung:

alle $\varphi_n(\vec r)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ sind normierte Einzellösungen

die allgemeine Lösung ist:

$$\boxed{\Psi(\vec r,t) = \sum_n c_n\, \varphi_n(\vec r)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}}$$

c_n: Koeffizienten, komplex, konstant

≙ Entwicklung nach vollständigem Funktionensystem

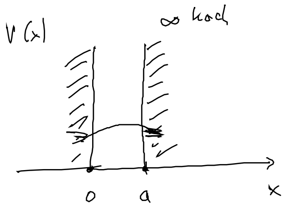
Anfangswertproblem: $\Psi(\vec r, t=0) = \sum_n c_n\, \varphi_n(\vec r)$, wichtig f. Bestimmung der c_n's:

$$\underbrace{\int d^3r\, \varphi_m^*(\vec r)\, \Psi(\vec r, t=0)}_{\text{bekannt}} = \sum_n c_n \underbrace{\int d^3r\, \varphi_m^*(\vec r)\, \varphi_n(\vec r)}_{\delta_{mn}} = \underline{\underline{c_m}}$$

c_m's sind damit bestimmt.

8.2. Beispiel: stationäre Zustände f. eingesperrte Teilchen

eindimensionales Potential $V(x)$



$$\underline{H} = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + V(x) \qquad V(x) = \begin{cases} 0 & 0<x<a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

innen: $-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\varphi(x) = E\,\varphi(x)$, außen $\varphi(x) \equiv 0$

⇝ Randbedingungen $\varphi(a) = 0 = \varphi(0)$

innen: freie Teilchen: $\frac{1}{\sqrt{a}}\, e^{\pm ikx} = \varphi_{\pm}\, e^{\pm ikx}$ oder: $\varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

k ist zu bestimmen: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Randbedingg.: $\varphi(0) = B \overset{!}{=} 0$, $\varphi(a) = A \sin(ka) \overset{!}{=} 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$; $n = 1, 2, 3 \ldots$

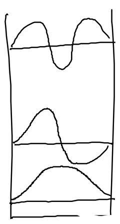
↳ Eigenfunktionen und Eigenwerte eines Teilchens im ∞ hohen Kasten:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \sim \underline{\underline{n^2}}$$

c) Darstellung der Wellenfkt. und Energien

$\varphi_n(x)$



E_3

$E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\, 4$

$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

0

$\Big\}$ niedrigste Energie $E_1 \neq 0$ aufgrund Unschärferelation