Wh:

$\hat{\underline{r}}$ Ortsoperator:

$\hat{\underline{p}}$ Impulsoperator:

$$\hat{\underline{p}} \to \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}$$ in der Ortsdarstellung

$$\hat{\underline{p}} \to \underline{p}$$ " " Impulsdarstellung

$$\hat{\underline{r}} \to -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}$$ " " "

$$\hat{\underline{r}} \to \underline{r}$$ " " Ortsdarstellung

Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Zeitabhängige SG: $\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$

II.6. Zeitunabhängige (stationäre) Schrödingergleichung

Annahme: $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig

$$\left(\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\hat{\underline{r}}) \right)$$

zeitabhängige SG in Ortsdarstellung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right)\psi(\underline{r},t)$$

formal: Partielle DGL!

Lösung durch Separationsansatz

$$\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r})\chi(t)$$

„Separation der Variablen"

Einsetzen in die SG

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(\varphi(\underline{r})\chi(t)\right) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right)\varphi(\underline{r})\chi(t)$$

$$i\hbar\, \varphi(\underline{r}) \frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\underline{r}) + V(\underline{r})\varphi(\underline{r})\right)\chi(t)$$

Umstellen.

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{\frac{\partial}{\partial t}\chi(t)}{\chi(t)}}_{\text{hängt nur von } t \text{ ab}} = \underbrace{\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\underline{r}) + V(\underline{r})\varphi(\underline{r})}{\varphi(\underline{r})}}_{\text{hängt nur von } \underline{r} \text{ ab}} = \frac{\hat{H}\varphi(\underline{r})}{\varphi(\underline{r})}$$

$\Rightarrow$ Beide Seiten der Gleichung müssen für alle $\underline{r}$ und t

gleich sein!

⇒ Es muss also gelten:

$$i\hbar \frac{\frac{\partial}{\partial t}\chi(t)}{\chi(t)} = \frac{\hat{H}\,\varphi(\underline{r})}{\varphi(\underline{r})} = \text{const} = E$$

Energie

⇒ Die beiden Gleichungen entkoppeln!

i) $i\hbar \frac{\partial \chi_E(t)}{\partial t} = E\,\chi_E(t)$

ii) $\hat{H}\,\varphi_E(\underline{r}) = E\,\varphi_E(\underline{r})$

Die Gleichung (ii)

$$\boxed{\hat{H}\,\varphi_E(\underline{r}) = E\,\varphi_E(\underline{r})}$$

nennt man die zeitunabhängige oder stationäre Schrödingergleichung

Bemerkungen

- Gleichung i) läßt sich leicht lösen.

$$i\hbar \frac{\partial \chi_E(t)}{\partial t} = E\, \chi_E(t)$$

$$\Rightarrow \chi_E(t) = \text{const} \cdot e^{-i/\hbar\, E t}$$

$$= \text{const} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\boxed{E = \hbar\omega}$$

- D.h. die Zeitabhängigkeit der Gesamt-Wellenfunktion $\psi(\underline{r}, t)$ ist sehr einfach gegeben durch

$$\sim e^{-i\omega t} \quad \text{mit } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

- Die stationäre SG

$$\boxed{\hat{H}\, \varphi_E(\underline{r}) = E\, \varphi_E(\underline{r})}$$

hat die Struktur einer Eigenwertgleichung

(ähnlich wie in der linearen Algebra: $\underset{\text{Matrix}}{\underline{A}}\, \underline{x}_a = a\, \underset{\text{Vektor}}{\underline{x}_a}$)

E : Energie – Eigenwert

$\varphi_E(\underline{r})$: Eigenfunktionen
(Eigenzustände) von $\hat{H}$
zur Energie E

Die Gesamtheit der Eigenwerte von $\hat{H}$
nennt man „Spektrum" von $\hat{H}$

man unterscheidet:

- kontinuierliche Eigenwerte $\longrightarrow$ kontinuierliches Spektrum
- diskrete Energie-Eigenwerte $\longrightarrow$ diskretes Spektrum
  „Energie ist quantisiert!"

- ~~Die~~ Eigenfunktionen mit verschiedenen Energien E_n können überlagert werden

$$\psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n \, \varphi_{E_n}(\underline{r}) \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Lösung für die zeitabhängige SG

Koeffizient

für diskretes Spektrum

(für kontinuierliches Spektrum:

$$\psi(\underline{r},t) = \int dE \, c_E \, \varphi_E(\underline{r}) \, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

allgemein: $\psi(\underline{r},t) = \sum\!\!\!\!\!\!\int dE \ldots$

II.7. Anwendungen der stationären SG in einer Dimension

II.7.1 Freies Teilchen in einer Dimension

$V(x) = 0$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \xrightarrow[\text{Ortsdarstellung}]{} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Stationäre SG (in Ortsdarstellung)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_E(x) = E\,\varphi_E(x)$$

(unterdrücke im folgenden den Index E an $\varphi_E(x)$)

Lösungen:

$$\varphi(x) = A_\pm e^{\pm\lambda x}$$ zwei linear unabhängige Lösungen

$$\text{mit } -\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 \stackrel{!}{=} E$$

$$\Leftrightarrow \hbar\lambda = \sqrt{-2mE}$$

$E > 0$: λ rein imaginär

d.h. $\lambda = ik$ mit $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$

$$\varphi_\pm(x) = A_\pm e^{\pm ikx}$$

ebene Wellen ($\underline{k} = \pm\hat{\underline{e}}_x$) Wellenvektor; Einheitsvektor in x-Richtung

rechts- oder linkslaufende Welle

Bemerkungen

- Die Lösungen sind ebene Wellen (wie schon früher gesehen!)

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$

- Jeder Wert $E > 0$ ist möglich

$\rightarrow$ kontinuierliches Spektrum

Frage: Gibt es auch Lösungen mit $E<0$?

λ reell $\Rightarrow$ $\varphi_\pm(x) = A_\pm e^{\pm \lambda x}$

damit $\varphi_\pm$ divergiert für $x \to \pm\infty$

physikalisch sinnlos

(da dann die statistische Interpretation von $|\varphi|^2$ als Aufenthaltswahrsch. verloren geht!)

---

zurück zu den Lösungen mit $E>0$

$$\varphi_\pm(x) = A_\pm e^{\pm ikx} \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

Es gibt also zwei unabhängige Lösungen für jede Energie E $\Rightarrow$ Energie-Eigenwert ist <u>zweifach</u> entartet

Bemerkung:
„Entartungen" haben häufig „mit Symmetrien des Hamiltonoperators zu tun

hier: $\hat{H}$ ist symmetrisch in x!

Normierung der Funktion?

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\varphi_\pm|^2 \overset{!}{=} 1$$

hier $|\varphi_\pm|^2 = |A_\pm|^2$

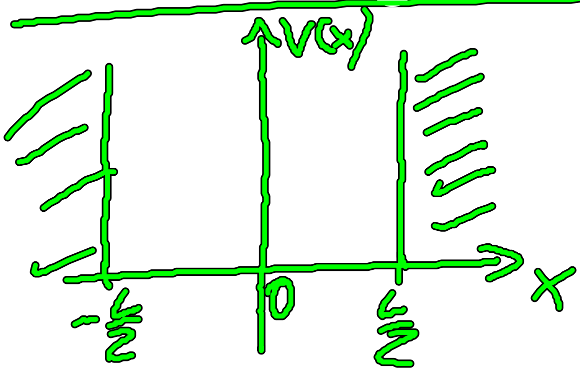
Häufig schreibt man: $\varphi_\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{\pm ikx}$

dann $\int_{-L/2}^{L/2} dx\, |\varphi_\pm|^2 = 1$

Idee dahinter:
Teilchenbewegung ist eingeschränkt auf (riesiges) Intervall $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$

führt strenggenommen auf neues Problem, nämlich „Teilchen im Kasten"!

II.7.2. Unendlich hoher Potentialtopf



$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x| < \frac{L}{2} \\ \infty & , |x| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

„Kastenpotential"

Vorüberlegungen

a) Auch hier ist $V(x)$ und damit $\hat{H}$ symmetrisch in x !

$\Rightarrow$ mit $\varphi(x)$ ist auch $\varphi(-x)$ Eigenfunktion !

$\Rightarrow$ Diese Funktionen können linear kombiniert werden

$\Rightarrow$ Eigenfunktionen können gruppiert werden in gerade Funktionen

$$\varphi_g(x) = \frac{1}{2}\left(\varphi(x) + \varphi(-x)\right)$$

Lösung mit gerader „Parität"

ungerade Anteile

$$\varphi_u(x) = \frac{1}{2}\left(\varphi(x) - \varphi(-x)\right)$$

„ungerader Parität"

b) $V(x) = \infty$ für $|x| > \frac{L}{2}$ „verbotener Bereich"

$\Rightarrow \underbrace{|\varphi(x)|^2}_{\text{Aufenthalts-wahrsch.}} = 0$ in diesem Bereich

Folgerungen: $\varphi(x) = 0$ für $|x| > \frac{L}{2}$

⟹ Wir müssen neue Lösungen für den Innenbereich suchen!
(V=0)

im Innenbereich gilt wieder $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) = E\varphi(x)$

wie beim freien Teilchen!

⟹ Lösungen sofort angeben.

$$\varphi_g(x) \sim \frac{1}{2}\left(e^{ikx} + e^{-ikx}\right)$$

$$\varphi_u(x) \sim \frac{1}{2}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$$

mit $\hbar k = \sqrt{2mE}$
$(E>0)$

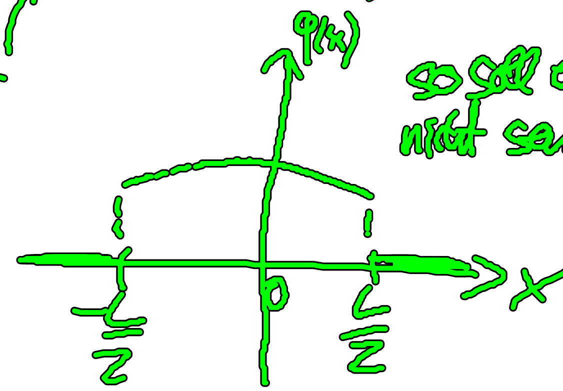
<u>Aber</u>: Im Unterschied zum freien Teilchen gibt es jetzt sogenannte „Anschlussbedingungen" für die Funktion $\varphi(x)$ bei $x = \pm\frac{L}{2}$!

Konkret fordern wir:

$$\varphi_{außen}\left(\frac{L}{2}\right) = \varphi_{innen}\left(\frac{L}{2}\right)$$

analog für $x = -\frac{L}{2}$

$\rightarrow$ Stetigkeit der Wellenfunktion $\varphi(x)$ an der Nahtstelle!



so soll es nicht sein!

denn:

φ ist unstetig bei $x = \pm\frac{L}{2}$

$$\rightarrow \frac{d\varphi}{dx} = a\,\delta\left(x \pm \frac{L}{2}\right) \rightarrow \infty \quad x = \pm\frac{L}{2}$$

Im Widerspruch zur Vorstellung, daß der Erwartungswert der kinet. Energie d.h. im wesentlichen $\langle p^2 \rangle$ endlich sein soll!

$$\langle p^2 \rangle = \int dx\, \varphi^*(x)\, \hat{p}^2 \varphi(x)$$

$$= \int dx\, (\hat{p}\varphi(x))^* (\hat{p}\varphi(x)) \qquad \hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\sim \int dx \left|\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|^2$$ soll endlich sein!

$\Rightarrow$ $\varphi(x)$ muß stetig sein!

Folgerung aus den Anschlußbedingungen

- $$\varphi_g\left(x=\pm\frac{L}{2}\right)=\frac{A_g}{2}\left(e^{\pm ik\frac{L}{2}}+e^{\mp ik\frac{L}{2}}\right)$$

$$=A_g\cos\left(\pm\frac{kL}{2}\right)\overset{!}{=}0$$

$\uparrow$

$\varphi_{\text{außen}}(x)$

$\Rightarrow$ es muß also gelten:

$$\frac{kL}{2}=\left(m+\frac{1}{2}\right)\pi \qquad m\in\mathbb{Z}$$

analog für

- $$\varphi_u\left(x=\pm\frac{L}{2}\right)=\frac{A_u}{2}\left(e^{\pm ik\frac{L}{2}}-e^{\mp ik\frac{L}{2}}\right)$$

$$=A_u\sin\left(\pm\frac{kL}{2}\right)\overset{!}{=}0$$

$\rightarrow$ es muß ~~also~~ gelten:

$$\frac{kL}{2}=m\pi \qquad m\in\mathbb{Z}$$

Zusammenfassung:

$\varphi_g = 0 \implies kL = (2m+1)\pi$

$\varphi_u = 0 \implies kL = 2m\pi$

bei $x = \pm \frac{L}{2}$

Die möglichen Energie-Eigenwerte sind

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2$$

Energie ist diskretisiert (quantisiert!)

$n = 1, 2, \ldots$ „Quantenzahl"

$n = 2m$ (ungerade Fkt.) bzw. $n = 2m+1$ (gerade Fkt.)

n gerade: Eigenfunktion ungerade

$$\varphi(x) = \varphi_u(x) = A_u \sin \frac{n\pi}{L} x$$

n ungerade: Eigenfunktionen gerade

$$\varphi(x) = \varphi_g(x) = A_g \cos \frac{n\pi}{L} x$$