3. Stationäre Probleme

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

$\underline{H} = \underline{H}(\vec{r},\vec{\underline{p}})$ und enthalte keine weiteren zeitabhängigen Felder oder Potentiale

man hat ein stationäres Problem vorliegen

(kein „dynamisches")

3.1. Separationsansatz

Ansatz: $\Psi(\vec{r},t) = \underbrace{f(t)\,\varphi(\vec{r})}_{\text{Zeit und Ort voneinander separiert}}$

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

$$\underbrace{i\hbar\,\frac{\partial_t f(t)}{f(t)}}_{\text{nur von}} = \underbrace{\frac{\underline{H}\,\varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}}_{\text{nur von Ort}} = \text{konstant} = E$$

Zahl

zeitabhängig abhängig

$\Rightarrow$ 2 Probleme:

(i) $$\frac{i\hbar \partial_t f}{f} = E \rightarrow i\hbar \partial_t f = f E$$

$$\rightarrow \boxed{f(t) = f_0 \, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}}$$ Zeitabhängigkeit

(ii) $$\frac{\underline{H}\varphi(r)}{\varphi(r)} = E \rightarrow \boxed{\underline{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})}$$

partielle Dgl. f. Ortsanteil

Eigenwertproblem des $\underline{H}$ Operators

<u>Gesamtlösg:</u>

$$\Psi(\vec{r},t) = f_0 \, \varphi(\vec{r}) \, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

E: Eigenwert zu $\underline{H}$

φ: Eigenfunktion zu $\underline{H}$

- wäre zunächst Lösg. der Schrödingergleichung
- nennt man stationären Zustand, weil: $|\Psi(r,t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$
- es gibt Zustände bei denen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte zeitlich nicht ändert
- Interpretation von E:

wissen: $\underline{H}\,\varphi = E\,\varphi$

ansehen: $\underline{H}\,\Psi = i\hbar\,\dot{\Psi} = E\,\underbrace{1\cdot\varphi(\vec{r})\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}} = E\,\Psi$

$$\int d^3r\,\Psi^*\,\underline{H}\,\Psi = \int d^3r\,\Psi^*\,E\,\Psi$$

Erwartungswert von $\underline{H}$ ausrechnen:

$$\langle \underline{H} \rangle \overset{\text{Def}}{=} \int d^3r\,\Psi^*(\vec{r},t)\;\underline{H}\;\Psi(\vec{r},t) = \int d^3r\,\Psi^*(\vec{r},t)\,E\;\Psi(\vec{r},t)$$

$$= E\,\underbrace{\int d^3r\;\Psi^*(\vec{r},t)\;\Psi(\vec{r},t)}_{=1}$$

$= 1$ (Interpretation als Wahrscheinlichkeits-dichte)

$$\langle \underline{H} \rangle = E$$

E ist damit als Energie zu interpretieren.

Der stationäre Zustand $\Psi = \varphi(\vec{r})\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ verfügt über die Energie E.

Es steht ein Eigenwertproblem, also müssen wir $\underline{H}\varphi = E\varphi$ lösen

3.2. Eigenwertproblem und vollständige Lösung

- eine Gleichung der Form $\underline{A}\,\varphi(\vec{r}) = a\,\varphi(\vec{r})$ ist eine Eigenwertgleichung

  a Eigenwert zur Eigenfunktion $\varphi(\vec{r})$

  Bestimmungsgleichung f. a und $\varphi(\vec{r})$

  in QM (später) sind a's die Messwerte die mit einer „gewissen" Wahrscheinlichkeit im Experiment gesehen werden.

- Lösung des Eigenwertproblems: hat viele Lösungen (1 ... N)

$$\Psi_n(\vec{r},t) = f_n\, e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\, \varphi_n(\vec{r}) \quad , \quad \text{und} \quad \underline{A}\,\varphi_n = a_n\,\varphi_n$$

n nummeriert die Lösungen

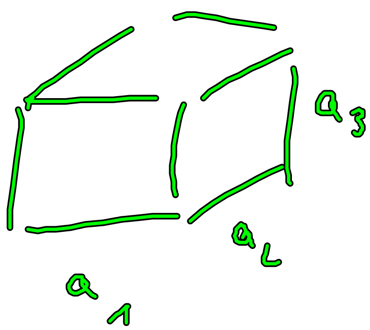
Gesamtlösung: $$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n f_n\, \varphi_n(\vec{r})\, e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

Konstante, wird über Anfangsbedingung festgelegt $\longrightarrow \Psi(\vec{r}, t=0) = \sum_n f_n\, \varphi_n$

3.3. Eigenwertproblem am Beispiel d. Kastenpotentials

Lösg von $\hat{H}\varphi(\vec r) = E\varphi(\vec r)$ „stationäre Schrödingergl."

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec r) \quad : \quad V(\vec r) = \begin{cases} 0 & 0 < x_i < a_i \\ \infty & \text{außen} \end{cases}$$



$x_i : x, y, z$

$$-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \varphi(\vec r) = E\varphi(\vec r) \quad \text{im Innenraum}$$

$$\varphi(\vec r) = 0 \quad \text{wegen } \infty \text{ Potential} \; ; \quad \text{im Außenraum}$$

Stetigkeit der Wellenfunktion am Rand $\varphi\left(\begin{matrix}\vec r = 0 \\ \vec r = \vec a\end{matrix}\right) \overset{!}{=} 0$

Separationsansatz: $\varphi(\vec r) = \varphi_1(x)\,\varphi_2(y)\,\varphi_3(z)$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_1(x)}{\varphi_1(x)}}_{\varepsilon_1 = \text{konst}} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{\partial^2}{\partial y^2}\varphi_2(y)}{\varphi_2(y)}}_{\varepsilon_2 = \text{konst}} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi_3(z)}{\varphi_3(z)}}_{\varepsilon_3 = \text{konst}} = \underbrace{E}_{\text{konst}}$$

$$\leftrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_1(x) = \varepsilon_1\,\varphi_1(x)$$

analog f. y_1 z - Richtg.

$$\boxed{\text{allg.}\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\varphi_i(x_i) = \varepsilon_i\,\varphi_i(x_i)}$$

$k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon_i$ einführen

$\varphi_i'' = -k_i^2\,\varphi_i$ Schwingungsgleichg.

$$\varphi_i = A_i \sin(k_i x_i) + B\cos(k_i x_i)$$

einsetzen

<u>Randbedingungen</u> :

(i) $\varphi_i(x_i = 0) = B_i \overset{!}{=} 0$, $B_i \equiv 0$

$\curvearrowright \quad \varphi_i = A_i \sin(k_i x_i)$

(ii) $\varphi_i(x_i = a_i) = \underbrace{A_i \sin(k_i a_i) \overset{!}{=} 0}_{}$

$$k_i a_i = n_i \pi$$

sinnlos (kein Teilchen)

ganzzahlig: $n_i = \cancel{0}, \pm 1, \pm 2 \ldots$

gibt dasselbe wie +

$$\frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon_i = \left(\frac{n_i \pi}{a_i}\right)^2 , \quad \varphi_i = A_i \sin\left(\frac{n_i \pi}{a_i} x_i\right)$$

mgl. Energien

$$E = \sum_i \varepsilon_i = \sum_i \frac{n_i^2}{2m}\left(\frac{\hbar \pi}{a_i}\right)^2$$

$$E = \frac{n_1^2}{2m}\left(\frac{\hbar \pi}{a_1}\right)^2 + \frac{n_2^2}{2m}\left(\frac{\hbar \pi}{a_2}\right)^2 + \frac{n_3^2}{2m}\left(\frac{\hbar \pi}{a_3}\right)^2$$

mgl. Zustände

$$\varphi(\vec{r}) = \prod_i A_i \sin\left(\frac{n_i \pi}{a_i} x\right)$$

$$\varphi(\vec{r}) = \underbrace{A_1 A_2 A_3}_{\text{Konstante}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a_1} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a_2} y\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a_3} z\right)$$

wird festgelegt über Wahrscheinlichkeitsinterpretation

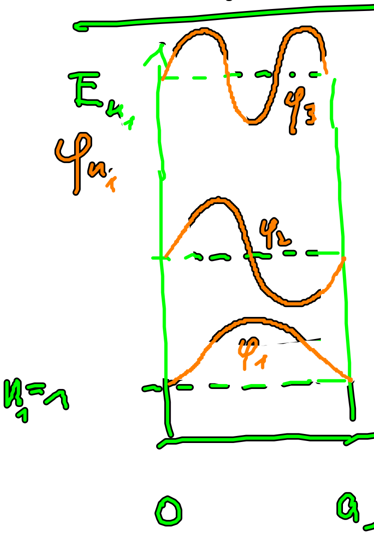
$$\int d^3 r \, |\varphi(\vec{r})|^2 = 1$$

$$\varphi(\vec r) = \underbrace{\left(\frac{8}{a_1 a_2 a_3}\right)^{1/2}}_{\text{zu Hause}} \sin(k_1 x)\,\sin(k_2 y)\,\sin(k_3 z)$$

$$E \to E_{n_1 n_2 n_3}$$

$$\varphi \to \varphi_{n_1 n_2 n_3}$$

a) Energie und Zustand im 1d Topf



$$E_3 = \frac{9}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a_1}\right)^2$$

$$E_2 = \frac{4}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a_1}\right)^2 \quad \text{erster angeregter Zustand}$$

$$E_1 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a_1}\right)^2 \quad \text{Grundzustand}$$

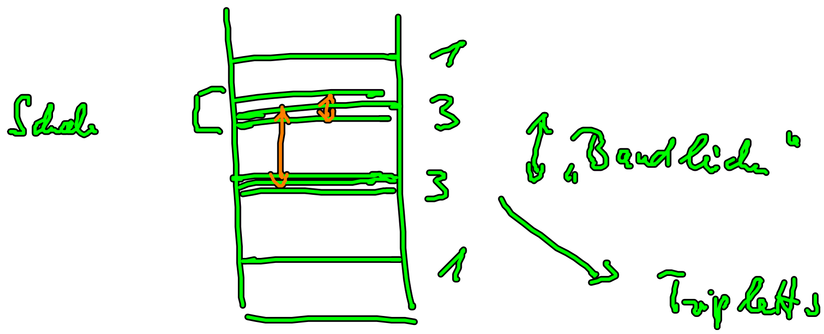
- es existieren <u>diskrete</u> Energieniveaus
- klassischer Grenzfall $a_1 \to \infty$, $\Delta E \to$ klein
- Zustand u. Energie wird nummeriert mit n
- geringste Energie $E_1 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a_1}\right)^2$

<u>Impulsunschärfe</u> durch Einsperren d. Teilchen im Ort wird in <u>kinetische Energie</u> umgesetzt

(Heisenbergsche Unschärfe)

b) Diskussion 3d Topf

Siehe Tutorium



Modell f. Atomkerne

4. Mathematische Werkzeuge der Quantenmechanik

a) Wellenfunktion $\Psi(\vec r) \in$ quadratintegrablen Funktionen L^2

$$\int d^3r \, |\Psi(\vec r)|^2 = 1$$

b) Operator $\underline{A}$ ist Vorschrift: $\underline{A}\,\Psi(\vec r) = \varphi(\vec r)$ gegeben

Bsp $\underline{A}\,\Psi(r) = a\, e^{\Psi(\vec r)} + \vec\nabla_r \Psi(\vec r) \equiv \varphi(\vec r)$

c) $\underline{A}$ ist ein linearer Operator, wenn:

$\underline{A}\psi_1 = \varphi_1, \quad \underline{A}\psi_2 = \varphi_2$

dann:

$$\underline{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$$

komplexe Zahl

Bsp: $\underline{A} = \vec{\nabla}_r$, nicht e^{ψ}

d) im allgemeinen ist die Hintereinanderausführung nicht vertauschbar:

$$\underline{A}\,\underline{B}\circ \neq \underline{B}\,\underline{A}\circ \quad \text{nichtkommutative Operatoren}$$

Bsp: $\underline{A} = \underline{x}$, $\underline{B} = p_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$

$$\left(\underline{B}(\underline{A}\psi)\right) = \frac{\hbar}{i}\partial_x(x\psi) = \underline{\underline{\frac{\hbar}{i}}}\psi + x\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi$$

$$\left(\underline{A}(\underline{B}\psi)\right) = x\left(\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi\right) = x\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi$$

$$\left(x p_x - p_x x\right)\psi = i\hbar\psi$$

Vertauschungsregel

e/ sinnvolle Größe zu definieren ist:

$$(\underline{A}\,\underline{B} - \underline{B}\,\underline{A}) \equiv [\underline{A}, \underline{B}] .$$

Kommutator der Operatoren $\underline{A}$ und $\underline{B}$.

$$\boxed{\text{Bsp}: [x, p_x] = i\hbar}$$

allgemein f. alle kartesischen Koordinaten

$$[x_n, p_m] = i\hbar\,\delta_{nm}$$

$x_1 = x$ $\quad$ $p_1 = \frac{\hbar}{i}\partial_x$

$x_2 = y$ $\quad$ $p_2 = \frac{\hbar}{i}\partial_y$

$x_3 = z$ $\quad$ $p_3 = \frac{\hbar}{i}\partial_z$