

Vorlesungen 7+8:

Roter Faden:

Lösung der Schrödingergleichung
Operatoren und Messungen

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.chemie.uni-bremen.de/stohrer/skript/QM-Skript.pdf>

Zum Mitnehmen

Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der QM wird gegeben durch das Quadrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl Ψ , die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt, z.B. für die Wahrscheinlichkeit P ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen gilt:

$$P = |\Psi(x, t)|^2$$

Ψ ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H \Psi(x, t) = E \Psi(x, t)$$

wobei H der Energieoperator und E die Energie ist

Nochmals "Herleitung" der Schrödingergleichung

Nehme zuerst de Broglie - Welle für eine ebene Welle \wedge freies Teilchen

$$\Psi = \exp i(kx - \omega t) \quad (1)$$

$$p = \hbar k \quad (2)$$

$$E = \hbar \omega \quad (3)$$

k, ω sind unabhängige Parameter, d.h. p und E unabhängig.

Für ein freies Teilchen muß jedoch gelten: $E = \frac{p^2}{2m}$ oder $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (4)

Schrödinger: Wie kann man (4) mit (1) verknüpfen?

p und E mit Ableitungen von Ψ nach x und nach t verknüpft:

$$\hbar \omega \Psi = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} \quad (5)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \quad (6)$$

(4) wird erfüllt, wenn gilt (siehe (5) + (6))

SG (7) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = i\hbar \frac{d\Psi}{dt}$$

Die Schrödingergleichung (Wellengl. kann Aufenthaltswahrscheinlichkeit (AW) eines Teilchen als Fkt. von Ort und Zeit zu bestimmen. Bedeutung in QM daher wie $F=ma$ der KM, womit Bahn als Fkt. von Ort und Zeit bestimmt wird!

Die relativistische Wellengleichung (Klein-Gordon-Gl.)

Relativistisch kann man eine ähnliche Gleichung herleiten:

$$\text{statt } E = \frac{p^2}{2m} \text{ benutzt man } E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$\text{oder } (\hbar\omega)^2 = (\hbar k)^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$\text{oder } i\hbar^2 \frac{d^2 \Psi}{dt^2} = \hbar^2 c^2 \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + m^2 c^4 \Psi$$

$$\text{oder } \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi(x, t) = 0$$

$$\text{oder } \left[\square + \frac{m_0 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi(x, t) = 0 \text{ (Klein-Gordon-Gleichung)}$$

$$\square \equiv \text{Quabla} \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta (\leftarrow \text{Laplace Operator}) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Ebenso :

Dirac-Gleichung für $s = \frac{1}{2}$ - Teilchen ($s = \frac{1}{2} = \text{Spin}$)

Proca-Gleichung für $s = 1$ Teilchen ($s = 1 = \text{Spin}$)

Für das Wasserstoffatom: $\alpha = \frac{v_{n=1}}{c} = \frac{1}{137}$ so $v \ll c$
→ nicht mehr relativistisch → Schrödingergleichung O.K.

Vorteil der SG: $E > 0$ (immer). KG: auch $E < 0$ (=Antiteilchen)

Lösung der SG

$\Psi(x, t)$ ist eine Funktion von 2 unabhängigen Variablen \rightarrow Variablentrennung, \rightarrow d.h. versuche Lösungen $\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$ (8)

Mathe:

Die allgemeine Lösung der DGL ist eine Linearkombination dieser trennbaren Lösungen : $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x)f_n(t)$

Für (8) gilt: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \varphi \frac{df}{dt}$ $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \varphi}{dx^2} f$ (9)

Schrödinger-Gleichung : (9) in (7) : (10)

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} (abh.vont)} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} (abh.vonx)} + V(r)$$

nur möglich wenn $L = R = \text{Konstante} \equiv E$

Jetzt: 2 Gleichungen:

1. $i\hbar \frac{df}{dt} \equiv E f$ (11)

2. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V \varphi = E \varphi$ (12)

(Die Variablentrennung hat die partielle DGL in zwei normale DGL umgewandelt!)

Lösung von (11) : $f(t) = \exp(-i \frac{Et}{\hbar})$

Lösung von (12) : nur lösbar, wenn das Potential $V(x)$ bekannt ist.

Allgemeine Lösung der Schrödingergleichung (13):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n \exp(i \frac{E_n t}{\hbar})$$

Lösung der SG

Beachte: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist unabhängig von t:

$$\int |\Psi|^2 dV \equiv \int \Psi^* \Psi dV = \int \varphi \exp(+i \frac{E_n t}{\hbar}) \varphi \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}) dV = \int \varphi^* \varphi dV = \int |\varphi|^2 dV$$

(unabhängig von t!)

Es gibt stationäre Lösungen!

Der Hilbert-Raum

Dreidimensionaler Vektorraum

Die *Vektoren* $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots$ sind die Elemente des Vektorraumes.

Die Vektoren sind eindeutig festgelegt durch die Angaben der *drei* Komponenten a_{pq} (mit $p = 1, 2, 3, \dots, \infty$ und $q = 1, 2, 3$) entlang der *drei* Basisvektoren \vec{e}_x, \vec{e}_y und \vec{e}_z , d. h. der Vektorraum ist *dreidimensional*.

	\vec{e}_x	\vec{e}_y	\vec{e}_z
\vec{r}_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}
\vec{r}_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}
\vec{r}_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Vektorsumme:

$$\vec{r}_3 = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 \quad (6.1)$$

HILBERT-Raum

Die *Funktionen* $f_1(\vec{r}), f_2(\vec{r}), f_3(\vec{r}), \dots$ sind die Elemente des HILBERT-Raumes.

Die Funktionen sind eindeutig festgelegt durch die Angabe der Funktionswerte für die *unendlich* vielen Punkte $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_\infty$ im dreidimensionalen Vektorraum, d. h. der HILBERT-Raum ist *unendlich-dimensional*.

	\vec{r}_1	\vec{r}_2	\dots	\vec{r}_∞
$f_1(\vec{r})$	$f_1(\vec{r}_1)$	$f_1(\vec{r}_2)$	\dots	$f_1(\vec{r}_\infty)$
$f_2(\vec{r})$	$f_2(\vec{r}_1)$	$f_2(\vec{r}_2)$	\dots	$f_2(\vec{r}_\infty)$
$f_3(\vec{r})$	$f_3(\vec{r}_1)$	$f_3(\vec{r}_2)$	\dots	$f_3(\vec{r}_\infty)$
\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots

Funktionsumme:

$$f_3(\vec{r}) = f_1(\vec{r}) + f_2(\vec{r}) \quad (6.2)$$

Der Hilbert-Raum

Skalarprodukt, d. h. Multiplikation korrespondierender Komponenten, dann Addition der (drei) Einzelprodukte.

Skalarprodukt, d. h. Multiplikation korrespondierender Funktionswerte, dann Integration über den Definitionsbereich des gesamten HILBERT-Raumes \mathbb{H}^∞ (Addition der unendlich vielen Einzelprodukte).

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \sum_{q=1}^3 a_{1q} a_{2q} \quad (6.3)$$

$$\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_{\mathbb{H}^\infty} f_1^*(\vec{r}) f_2(\vec{r}) dV \quad (6.4)$$

Orthogonalität, d. h. gilt $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = 0$, dann sind \vec{r}_1 und \vec{r}_2 linear unabhängig.

Orthogonalität, d. h. gilt $\langle f_1 | f_2 \rangle = 0$, dann sind $f_1(\vec{r})$ und $f_2(\vec{r})$ linear unabhängig.

Vektortransformation: $\bar{T}\vec{r}_1 = \vec{r}_2$

Funktionsoperation: $\bar{O}f_1(\vec{r}) = f_2(\vec{r})$

$$\begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{21} \\ a_{22} \\ a_{23} \end{bmatrix}$$

Wenn $O|f_1\rangle = o|f_1\rangle$ dann heisst $|f_1\rangle$ eine Eigenfkt. von O und o der zu O gehörende Eigenwert. Eigenwerte entsprechen Messwerte!

Die Transformationsmatrix \bar{T} ist linear, wenn $\bar{T}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \bar{T}(\vec{r}_1) + \bar{T}(\vec{r}_2)$

Der Operator \bar{O} ist linear, wenn $\bar{O}(f_1(\vec{r}) + f_2(\vec{r})) = \bar{O}(f_1(\vec{r})) + \bar{O}(f_2(\vec{r}))$

Der Hilbert-Raum

Jeder Vektor \vec{r}_p ist auf jede vollständige Basis „projizierbar“.

$$\vec{r}_p = a_{p1}\vec{e}_x + a_{p2}\vec{e}_y + a_{p3}\vec{e}_z \quad (6.5)$$

Jede Funktion $f_p(\vec{r})$ ist auf jede vollständige Basis „projizierbar“.

$$f_p(\vec{r}) = \sum_{q=1}^{\infty} a_{pq}\varphi_q(\vec{r}) \quad (6.7)$$

Einheitsvektoren im Hilbert-Raum meistens geschrieben als: „ket-Vektoren“ $|\Phi\rangle$ und das Skalarprodukt wird dann $\langle\Phi|\Phi\rangle$ wobei $\langle\Phi|$ als „bra-Vektor“ bezeichnet wird und komplex konjugiert + transponiert bedeutet.

Skalarprodukt ist also ein „bracket“ und entspricht „Modulus“ einer komplexen Zahl, z.B. $\Phi=(x, +iy, 0)$ und $\Phi^*=(x, -iy, 0) \rightarrow$
 $\langle\Phi^*|\Phi\rangle=x^2+y^2$.

Eigenwerte und Eigenfunktionen

Eigenfunktionen beschreiben Eigenzustände, d.h. physikalisch mögliche Zustände, die durch messbare Größen, den Eigenwerten, charakterisiert werden.

Allgemeine Eigenfunktionsgleichung: $\hat{O} \Psi = O \Psi$ (\hat{O} = Operator, O = Eigenwert)
Operator anwenden entspricht der Durchführung einer Messung.

→ Kollaps der Wellenfunktion auf Eigenfunktion, z.B. Schrödingers Katze:

$$\Psi_K = c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} \rightarrow \hat{O} \Psi_K = \Psi_b \text{ oder } \hat{O} \Psi_K = \Psi_{nb}$$

(↔ Messung durchführen = "gucken" → Eigenfunktion Ψ_b oder Ψ_{nb} .)

Grundpostulat der Quantenmechanik:

Messungen und Projektionsoperatoren der Wellenfkt. auf Eigenfkt führen beide zur "Kollaps" der Wellenfkt auf eine Eigenfkt. Der Eigenwert o der Eigenfunktionsgleichung $\hat{O}\Psi = o\Psi$ ist identisch mit dem Messwert. Zu jedem Messvorgang gibt es einen entsprechenden Operator.

Kurzfassung der Eigenschaften der Eigenfunktionen

1. Eigenfunktionen sind orthonormal, d.h. ihr Skalarprodukt ist $= 0$;
2. übliche Schreibweise: $|\Psi\rangle = \Psi \langle \Psi| = \Psi^*$
(Dirac - Notation: $\langle| = \text{BraVektor}, | \rangle = \text{KetVektor} \langle| \rangle \text{ Bracket}$)

$$\int \Psi^* \Psi dV = \int |\Psi|^2 dV \equiv \langle \Psi | \Psi \rangle$$

(Beachte: Ψ komplex, daher $\Psi = a + ib$ oder $A \exp(i\varphi) \rightarrow \Psi^* = a - ib$
oder $a \cdot \exp(-i\varphi) \rightarrow \Psi^* \Psi = (a+ib)(a-ib) = a^2 + b^2$
oder $\Psi^* \Psi = A \exp(-i\varphi) \cdot A \exp(i\varphi) = A^2$)

Orthonormal: $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle = 1$
 $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = 0$

z.B.: $\langle \Psi_K | \Psi_K \rangle = \langle c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} | c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} \rangle$
 $= c_1^2 \langle \Psi_b | \Psi_b \rangle + c_2^2 \langle \Psi_{nb} | \Psi_{nb} \rangle + 2c_1 c_2 \langle \Psi_b | \Psi_{nb} \rangle$
 $= c_1^2 + c_2^2 = 1$, wobei:

$c_1^2 =$ Wahrscheinlichkeit, dass Katze bewusstlos ist
 $c_2^2 =$ Wahrscheinlichkeit, dass Katze nicht bewusstlos ist

2. Eigenfunktionen sind komplett, d.h. alle möglichen Eigenzustände sind berücksichtigt ("Vektorraum komplett aufgespannt")

z.B.: Ψ_K hat nur 2 orthonormale Komponenten, d.h. die Katze ist entweder bewusstlos oder nicht bewusstlos.

Bei der Eigenfunktion der Energie hat man unendlich viele Energieniveaus

($E \propto \frac{1}{n^2}$) $\rightarrow \infty$ großer Vektorraum \rightarrow Eigenfunktion und Polynome mit unendlich vielen Termen.

Beispiel

Gegeben sei der Zustandsvector eines Systems mit zwei möglichen Zuständen $|\Psi\rangle = \alpha_1|\Phi_1\rangle + \alpha_2|\Phi_2\rangle$. Die Eigenfunktionen sind $|\Phi_1\rangle$ und $|\Phi_2\rangle$ und eine Messung wird mit Wahrscheinlichkeit α_1^2 das System in Zustand $|\Phi_1\rangle$ vorfinden.

In der QM wird diese Wahrscheinlichkeit ausgerechnet durch Anwendung des Operators A auf den Zustandsvektor. Z.B. $A|\Phi_1\rangle = |\Phi_1\rangle$ und $A|\Phi_2\rangle = 0$ wenn A der Projektionsoperator auf den Zustand $|\Phi_1\rangle$ entspricht. Weiter gilt für orthogonale Basis $\langle \Phi_1|\Phi_1\rangle = 1$ $\langle \Phi_1|\Phi_2\rangle = 0$

In der Praxis entspricht die Anwendung eines Operators eine Messung, weil eine Messung auch den Zustandsvektor auf eine Eigenfunktion projiziert! Z.B. Operator A entspricht bei der Katze eine Messung des Blutdruckes, womit bestätigt wird dass die Katze nicht bewusstlos ist. Beide, Messung und Operatoranwendung verursachen einen Kollaps der Wellen- oder Zustandfunktion auf einen Basisvektor (=Eigenzustand).

Damit gilt $\langle \Psi|A|\Psi\rangle = \alpha_1\langle \Phi_1|A\alpha_1|\Phi_1\rangle + \alpha_2\langle \Phi_2|A\alpha_2|\Phi_2\rangle = \alpha_1^2$ d.h. der "Überlapp" von $|\Psi\rangle$ und $\langle \Phi_1|$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit.

Erwartungswerte

Allgemein: Erwartungswert $\langle O \rangle$ einer Variablen $O(x)$ ist $\int O(x)f(x)dx$,

wobei $f(x)$ die Wahrscheinlichkeit ist, dass $O(x)$ vorkommt.

In Bracket-Schreibweise: $\langle O \rangle = \int \Psi^* \hat{O}(x) \Psi(x)dx = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$,

wobei $\Psi(x)$ eine Eigenfunktion des Operators \hat{O} ist, d.h. $\hat{O}\Psi(x) = O\Psi$ ($O = \text{Messwert}$).

Beweis: $\langle O \rangle \{\text{Erwartungswert}\} = \int \Psi^* \hat{O} \Psi dx = \{\hat{O}\Psi = O\Psi\} = O \int \Psi^* \Psi dx = O \{\text{Messwert}\}$

Aufgabe: Finde für jeden möglichen Messwert den zugehörigen Operator \hat{O} .

Energieoperator: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, denn es gilt:

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ (← Schrödingergleichung) mit $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Hieraus folgt:

- Impulsoperator: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
- Ortsoperator: $\hat{x} = x$
- Drehimpuls: $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l}_z = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

In Komponenten: $l_z = xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$

Beachte:

Jede Messung projiziert Ψ auf Eigenfunktion, d.h. beeinflusst Ψ . Dies kann in Theorie nachvollzogen werden durch Projektionsoperator, der auch "Kollaps" der Wellenfkt. herbeiführt.

Zusammenfassung der Operatoren für Observablen

$$\langle O \rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \bar{O} \Psi \, dV}{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi \, dV}$$

$$x \quad x$$

$$y \quad y$$

$$z \quad z$$

$$\vec{r} \quad \vec{r}$$

$$p_x \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{p} \quad -i\hbar \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$O = f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad \bar{O} = f(\vec{r}, -i\hbar \nabla, t)$$

$$E \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Kurzschreibweise für
Berechnung eines
Mittelwertes eines
Operators (entspricht
Mittelwert einer Messung):

$$\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$$

Vertauschungsrelationen

Allgemein: 2 Observable sind gleichzeitig messbar, wenn $\hat{O}_2\hat{O}_1 = \hat{O}_1\hat{O}_2$, d.h. die Operatoren sind vertauschbar, oder $\hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1 = 0$

In Kurzform : $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$ ($[\hat{O}_1\hat{O}_2] \equiv \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1$) **(auch Kommutator genannt)**

Beweis: $\hat{O}_1\Psi = O_1\Psi \rightarrow \times \hat{O}_2) \rightarrow \hat{O}_2\hat{O}_1\Psi = O_2O_1\Psi$ (1)

$(\hat{O}_2\hat{O}_1 - \hat{O}_1\hat{O}_2)\Psi = (O_2O_1 - O_1O_2)\Psi = 0$, wenn Ψ gleichzeitig Eigenfkt. von \hat{O}_1 und \hat{O}_2 ist. Kommutator gleich 0 bedeutet also das Messung von O_1 keine Nachwirkung für anschließende Messung von O_2 hat. Umgekehrt: wenn Kommutator zweier Variablen $\neq 0$, dann sind diese nicht gleichzeitig scharf zu bestimmen. Unsicherheit gegeben durch [].

Bsp $\hat{O}_x\hat{O}_p\Psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ (3)

$$\hat{O}_p\hat{O}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\Psi + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$
 (4)

$$(\hat{O}_x\hat{O}_p - \hat{O}_p\hat{O}_x)\Psi = \frac{\hbar}{i}\Psi \text{ oder } [\hat{O}_x\hat{O}_p] = \frac{\hbar}{i}$$

\Rightarrow Ort und Impuls sind NICHT gleichzeitig messbar, weil die Operatoren nicht vertauschbar sind (wie man das ja aus der Heisenberg'schen Unschärferelation auch erwartet hatte).

Weitere Vertauschungsrelationen

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$l_z = xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0, \quad j=x,y,z$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$$

Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten nur gleichzeitig zu bestimmen.

Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Eigenfunktionen der Energie sind auch Eigenfunktionen des Drehimpulses.

Zustandsvektor für die Energie im Vektorraum unendlich vieler Energien:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n \quad (\Psi_n = \text{Eigenfunktion für das Energieniveau } E_n)$$

$$\rightarrow \langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n^2$$

c_n^2 = Wahrscheinlichkeit, Energie E_n zu messen.

Bei Messungen an vielen Atomen (NICHT viele Messungen an EINEM Atom wegen Kollaps der Wellenfunktion!)

$$\text{findet man für die mittlere Energie : } \langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n^2$$

Bedingungen einer Zustandsfunktion

Eine Zustandsfunktion muß, außer daß sie Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist, drei Kriterien erfüllen, damit sie physikalisch „sinnvoll“ sein kann:

1. Stetigkeit:

Es darf keine „Sprünge“ im Funktionsverlauf geben.

2. Eindeutigkeit:

Zu jeder Kombination von Variablenwerten gibt es genau einen Funktionswert.

3. Quadratische Integrierbarkeit und Normierbarkeit:

Die bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2) erhaltene Zustandsfunktion Ψ ist nicht notwendigerweise normiert, das heißt das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ ist nicht notwendigerweise a priori gleich eins. Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen 1 irgendwo im Raum, das Teilchen 2 ebenfalls irgendwo im Raum, ... und das Teilchen N irgendwo im Raum zu finden, gleich eins ist, muß dieses Integral aber immer gleich eins sein. Um dies zu erreichen, wird die Funktion Ψ mit der Normierungskonstanten c multipliziert, wobei c dadurch bestimmt wird, daß das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ (als „Summe“ der differentiell kleinen Einzelwahrscheinlichkeiten dW) gleich eins gesetzt wird:

$$\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1 \quad (2.9)$$

Daraus folgt der Ausdruck

$$c^* c = \frac{1}{\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N}, \quad (2.10)$$

der nur dann definiert ist, wenn das Integral im Nenner endlich ist; die Zustandsfunktion also, wie man sagt, quadratisch integrierbar ist. Die Funktion $c\Psi$ ist ebenfalls Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung:

Übersicht der Postulate der QM

Postulat 1 (Existenz einer Zustandsfunktion) Jeder Zustand eines Systems von N Teilchen mit der jeweiligen Masse m_i wird so vollständig wie möglich durch eine Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ beschrieben.

Jede experimentell meßbare Größe des Systems („Observable“) kann mittels der Zustandsfunktion Ψ berechnet werden.^a So ist beispielsweise der Ausdruck $\Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ proportional der Wahrscheinlichkeit dW zur Zeit t das Teilchen 1 an der Stelle \vec{r}_1 im Volumenelement dV_1 , das Teilchen 2 an der Stelle \vec{r}_2 im Volumenelement dV_2 , ... und das Teilchen N an der Stelle \vec{r}_N im Volumenelement dV_N zu finden.

Postulat 2 (Quantenmechanische Operatoren) Zu jeder Observablen O des Systems korrespondiert ein entsprechender quantenmechanischer Operator \bar{O} , deren elementaren Vertreter in der Tabelle : aufgelistet sind.

Postulat 3 (Scharfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die Eigenfunktion zum Operator \bar{O} sei, so daß gilt $\bar{O}\Psi = o\Psi$. Jede Messung der Observablen O an den einzelnen Systemen ergibt immer den gleichen Wert o ; jede sich wiederholende Messung an ein und demselben System ergibt ebenfalls immer den selben Wert o , sofern die Messung nicht den ursprünglichen Zustand Ψ des Systems verändert.

Postulat 4 (Unschärfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die nicht Eigenfunktion zum Operator \bar{O} sei. Messungen der Observablen O an den einzelnen Systemen führen nicht zum jeweils gleichen Wert, sondern zu einer Verteilung, deren Erwartungswert^b

durch $\langle o \rangle = \langle \Psi | \bar{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ gegeben ist.

^aDie Variablen $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t$ der Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ werden häufig aus Platzgründen nicht explizit angegeben.

^bBei einer endlichen Zahl von Messungen wird der gefundene Mittelwert in der Regel vom berechneten Erwartungswert abweichen; erst bei einer unendlichen Zahl von Messungen geht der Mittelwert in den Erwartungswert über.

Übersicht der Postulate der QM

Postulat 5 (Schrödinger-Gleichung) Die Zustandsfunktion Ψ ist Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2).

$$\boxed{\overline{E}\Psi = \overline{H}\Psi = (\overline{E}_{kin} + \overline{V})\Psi} \quad (2.2)$$

Der Operator $\overline{H} = \overline{E}_{kin} + \overline{V}$ wird als HAMILTON-Operator bezeichnet, wobei \overline{E}_{kin} und \overline{V} für die Operatoren der kinetischen bzw. potentiellen Energie stehen. Diese Operatoren ergeben sich aus den klassischen Observablen gemäß Postulat 2 wie folgt:

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 \quad (2.3)$$

$$\Rightarrow \overline{E}_{kin} = \frac{1}{2m}\overline{\vec{p}}\overline{\vec{p}} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.4)$$

^cDas Integral $\int_{\mathbb{R}^3} \square dV$ bezeichnet die Integration über den gesamten Definitionsbereich des dreidimensionalen Raumes \mathbb{R}^3 und stellt damit eine Kurzschreibweise für das dreifache Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \square dx dy dz$ dar. Der Ausdruck dV bezeichnet hierbei das differentiell kleine Volumenelement $dV = dx dy dz$.

In der Literatur werden die Integrationsgrenzen bei der Integration über den gesamten dreidimensionalen Raum häufig weggelassen, so daß sich die Symbolik für diese Operation auf den Ausdruck $\int \square dV$ beschränkt.

Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Die zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung für diesen einfachen Fall lautet dann:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) \quad (2.13)$$

Es gilt jetzt, eine Funktion $\Psi(x, t)$ zu finden, die sowohl dieser Gleichung genügt als auch alle Nebenbedingungen erfüllt.

1. Ansatz

Am simpelsten ist die Methode, sich der bereits bekannten Funktion (1.36) einer harmonischen Welle zu bedienen.

$$\Psi(x, t) = A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.14)$$

Durch Einsetzen überprüft man, ob die Funktion Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist.

$$i\hbar A \frac{\partial \sin(k_x x - \omega t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A}{2m} \frac{\partial^2 \sin(k_x x - \omega t)}{\partial x^2} + V_0 A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.15)$$

$$-i\hbar A \omega \cos(k_x x - \omega t) = \frac{\hbar^2 A k_x^2}{2m} \sin(k_x x - \omega t) + V_0 A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.16)$$

$$-i\hbar \omega \cos(k_x x - \omega t) = \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \right) \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.17)$$

Diese Funktion ist offensichtlich nicht Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, da die linke Seite nicht gleich der rechten ist.

Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall (1)

Durch Einsetzen wird wieder geprüft, ob die Funktion (2.18) Lösung der Gleichung (2.13) ist.

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)} = Ae^{ik_x x} e^{-i\omega t} \quad (2.18)$$

$$i\hbar A \frac{\partial e^{i(k_x x - \omega t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A}{2m} \frac{\partial^2 e^{i(k_x x - \omega t)}}{\partial x^2} + V_0 A e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.19)$$

$$i\hbar(-i\omega) A e^{i(k_x x - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) A e^{i(k_x x - \omega t)} + V_0 A e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.20)$$

$$i\hbar(-i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) + V_0 \quad (2.21)$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.22)$$

$$\omega = \frac{\hbar k_x^2}{2m} + \frac{V_0}{\hbar} \quad (2.23)$$

Die Funktion ist also dann Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, wenn die Bedingung der Gleichungen (2.22) bzw. (2.23) erfüllt ist.

**Nur komplexe Funktionen als Lösung der SG!
Gilt nicht für relat. Klein-Gordon-Gleichung,
weil dort die ZWEITE Ableitung der Zeit vorkommt.**

Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall (2)

Die Bedingung (2.22) ist physikalisch sinnvoll, da sie nach Einsetzen der DE BROGLIE-Gleichungen (1.56) und (1.57) zur klassischen Energiebedingung führt.

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.22)$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{p_x^2}{m} + V_0 \quad (2.24)$$

$$E = \frac{1}{2} m v_x^2 + V_0 \quad (2.25)$$

Die Zustandsfunktion $\Psi(x, t) = A e^{i(k_x x - \omega t)}$ ist, wie bereits erwähnt, eine komplexe Funktion und kann nach EULER in einen Realteil und einen Imaginärteil zerlegt werden.

$$\Psi(x, t) = A \cos(k_x x - \omega t) + iA \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.26)$$

Der reelle Funktionsteil steht für eine sich in x -Richtung von links nach rechts bewegende harmonische Welle mit der x -Komponente k_x des Wellenvektors \vec{k} und der Kreisfrequenz ω . Für den imaginären Funktionsteil gilt dies analog im imaginären Raum.

Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall (3)

Als nächstes soll die konjugiert komplexe Funktion von $\Psi(x, t)$ in Gleichung (2.27) getestet werden.

$$\Psi^*(x, t) = A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.27)$$

$$i\hbar A^* \frac{\partial e^{-i(k_x x - \omega t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A^*}{2m} \frac{\partial^2 e^{-i(k_x x - \omega t)}}{\partial x^2} + V_0 A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.28)$$

$$i\hbar(i\omega)A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}(i^2 k_x^2)A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} + V_0 A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.29)$$

$$i\hbar(i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m}(i^2 k_x^2) + V_0 \quad (2.30)$$

$$-\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.31)$$

Die Funktion ist zwar im mathematischen Sinne Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, aber vom physikalischen Standpunkt aus unsinnig, da eine negative Gesamtenergie $-\hbar\omega$ resultierte, während die Gegenseite $\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0$ immer positiv ist.

Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall (4)

Eine Variation der Funktion $\Psi(x, t)$ ist die Funktion $\Psi'(x, t) = Ae^{i(-k_x x - \omega t)}$. Wie sich sehr leicht durch Vergleich zeigen läßt, ist $\Psi'(x, t)$ ebenfalls Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, mit dem gleichen Ergebnis wie im Ansatz 2. Die Zustandsfunktion $\Psi'(x, t)$ beschreibt ein sich auf der x -Achse nach links bewegendes Teilchen. Die allgemeinen Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung lauten dann folgendermaßen:

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = \Psi \pm \Psi' \quad (2.36)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)} \pm Ae^{i(-k_x x - \omega t)} \quad (2.37)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{-i\omega t} (e^{ik_x x} \pm e^{-ik_x x}) \quad (2.38)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{-i\omega t} (\cos(k_x x) + i \sin(k_x x) \pm \cos(k_x x) \mp i \sin(k_x x)) \quad (2.39)$$

$$\Psi'_1(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} \cos(k_x x) \quad (2.40)$$

$$\Psi'_2(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} i \sin(k_x x) \quad (2.41)$$

Beide Zustandsfunktionen entsprechen im Realteil stehenden Wellen und sind ebenfalls physikalisch sinnvolle Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung, wie sich durch Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung leicht zeigen läßt.

Zusammenfassung

Tabelle 2.2 Die Wahrscheinlichkeitsdichten und Eigenwertgleichungen für die gefundenen Zustandsfunktionen. Die erste Spalte enthält die zugrundeliegenden Funktionen, die alle Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung sind. Die zweite Spalte enthält die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen. In den letzten drei Spalten sind die Eigenwertgleichungen für die angegebenen Observablen aufgeführt; der erste Teil der Gleichung steht im Tabellenkopf, der zweite in der Tabelle.

Funktion f	$\frac{dW}{dx} = f^* f = \dots$	$\overline{p_x} f = \dots$	$\overline{E} f = \dots$	$\overline{H} f = \dots$
$\Psi(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)}$	$A^* A$	$\hbar k_x \Psi$	$\hbar \omega \Psi$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi$
$\Psi'(x, t) = Ae^{i(-k_x x - \omega t)}$	$A^* A$	$-\hbar k_x \Psi'$	$\hbar \omega \Psi'$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'$
$\Psi'_1(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} \cos(k_x x)$	$4A^* A \cos^2(k_x x)$	e	$\hbar \omega \Psi'_1$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'_1$
$\Psi'_2(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} i \sin(k_x x)$	$4A^* A \sin^2(k_x x)$	e	$\hbar \omega \Psi'_2$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'_2$

[A*Adx wird ∞ für $x \rightarrow \infty$ da A*A unabh. von x! Also ebene Welle NICHT quad. integrierbar. Muss Welle lokalisieren, damit A*A null wird im Unendlichen!!!

Erwartungswert von p

Der Erwartungswert wird hier nur einmal exemplarisch für die Zustandsfunktion $\Psi_1'(x, t)$ berechnet, da das Ergebnis für $\Psi_2'(x, t)$ das gleiche ist.

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1'^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_1'(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1'^*(x, t) \Psi_1'(x, t) dx} \quad (2.52)$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} 2A^* e^{i\omega t} \cos(k_x x) \{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\} 2A e^{-i\omega t} \cos(k_x x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} 2A^* e^{i\omega t} \cos(k_x x) 2A e^{-i\omega t} \cos(k_x x) dx} \quad (2.53)$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{4A^* A i\hbar k_x \int_{-\infty}^{\infty} \cos(k_x x) \sin(k_x x) dx}{4A^* A \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2(k_x x) dx} \quad (2.54)$$

Dieses Integral läßt sich leicht graphisch lösen. Das Integral $\int \cos(k_x x) \sin(k_x x) dx$ im Zähler ist über eine ganzzahlige Phase gleich null, ansonsten endlich und klein, nämlich maximal $\frac{1}{2k_x}$, wie sich graphisch ebenfalls leicht zeigen läßt. Das Integral $\int \cos^2(k_x x) dx$ im Nenner ist unendlich groß.

Damit folgt für den Gesamtausdruck:

$$\langle p_x \rangle = i\hbar k_x \frac{a}{\infty} \quad 0 \leq |a| \leq \frac{1}{2k_x} \quad (2.55)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (2.56)$$

Abschließend bleibt zu bemerken, daß zwar alle vier Zustandsfunktionen Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung sind, sie aber im Sinne der Quantenmechanik noch keine „guten“ Zustandsfunktionen darstellen, da keine von ihnen quadratisch integrierbar ist.

Wellenpakete sind Lösung der SG

Wellenpaket ist Superposition vieler Wellen:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) \frac{\partial e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial t} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) \frac{\partial^2 e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial x^2} dk_x \quad (2.61)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) (-i\omega(k_x)) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) (i^2 k_x^2) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.62)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hbar \omega(k_x) C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} \hbar \frac{\hbar k_x^2}{2m} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.63)$$

Die letzte Gleichung ist aber nur dann gültig, wenn die Bedingung $\omega(k_x) = \hbar k_x^2 / (2m)$ erfüllt ist, da nur dann die Integranden gleich sind, q. e. d.

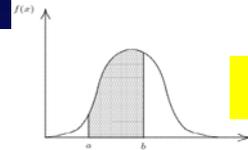
Wellenpakete sind Lösung der SG und sind quadratisch integrierbar

Wellenpakete als Lösung der SG jedoch begrenzt durch Unschärferelation

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$C(k_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ik_x x} dx$$

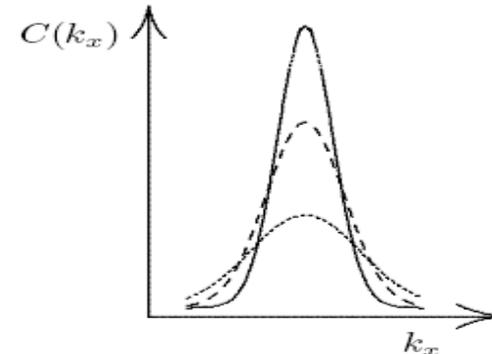
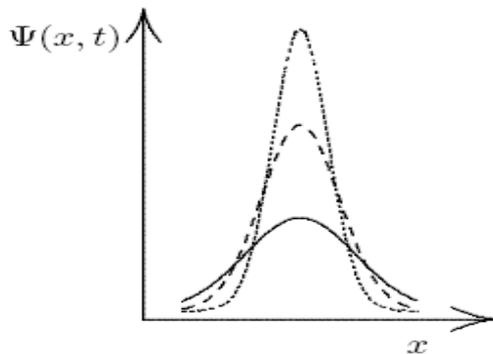
Liegt als Anfangsbedingung eine Gauss-Kurve vor



Wahrscheinlichkeitsdichte $\langle \Psi | \Psi \rangle$

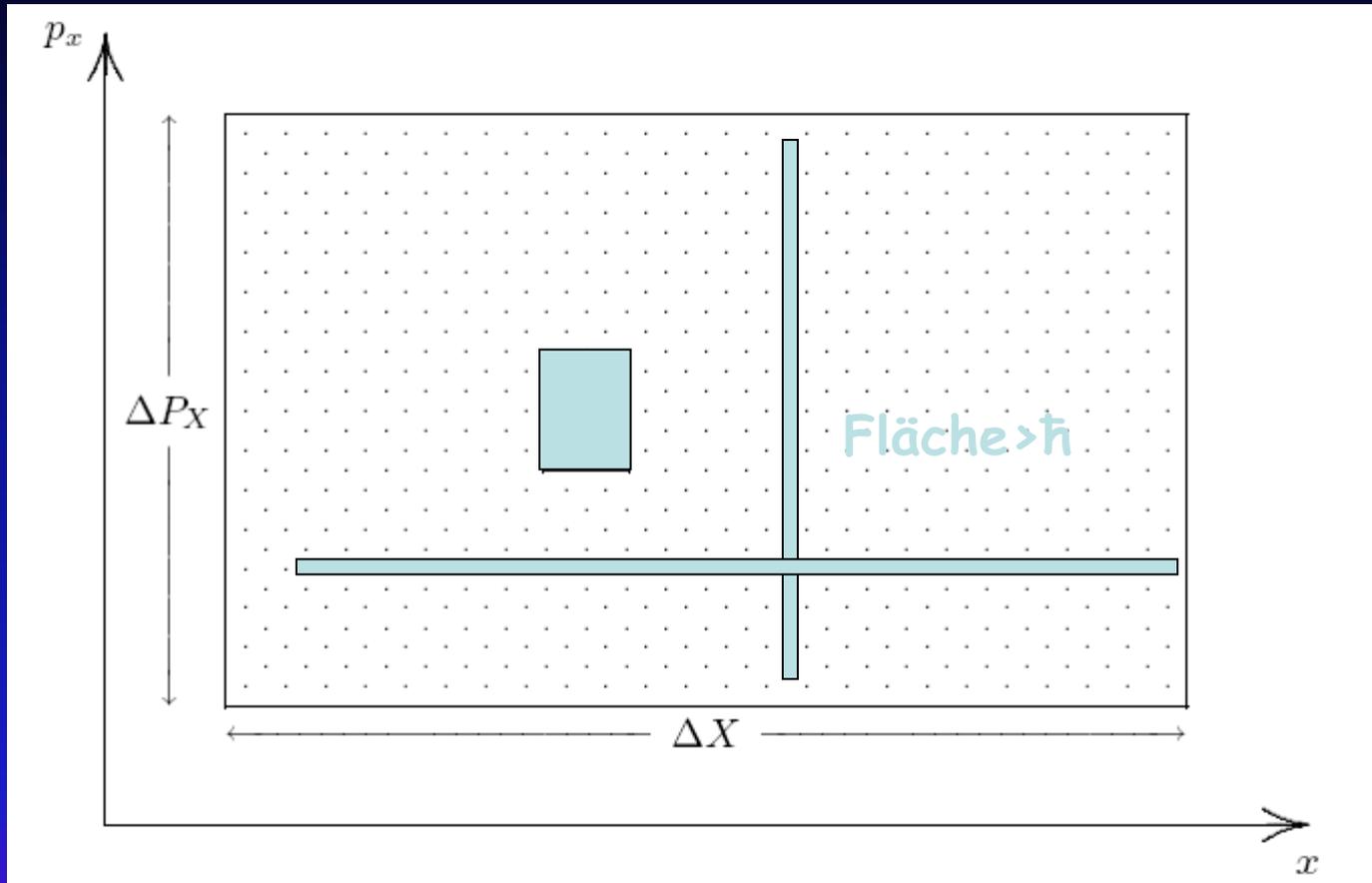
$\Psi(x, 0) = u_0 \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2}\right\}$, so ist $C(k) = \frac{u_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2} - ikx\right\} dx = u_0 \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{b^2}{2} k^2\right\}$

ebenfalls eine Gauss-Kurve, denn es ist $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-px^2 + qx\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \exp\left\{\frac{q^2}{4p}\right\}$.



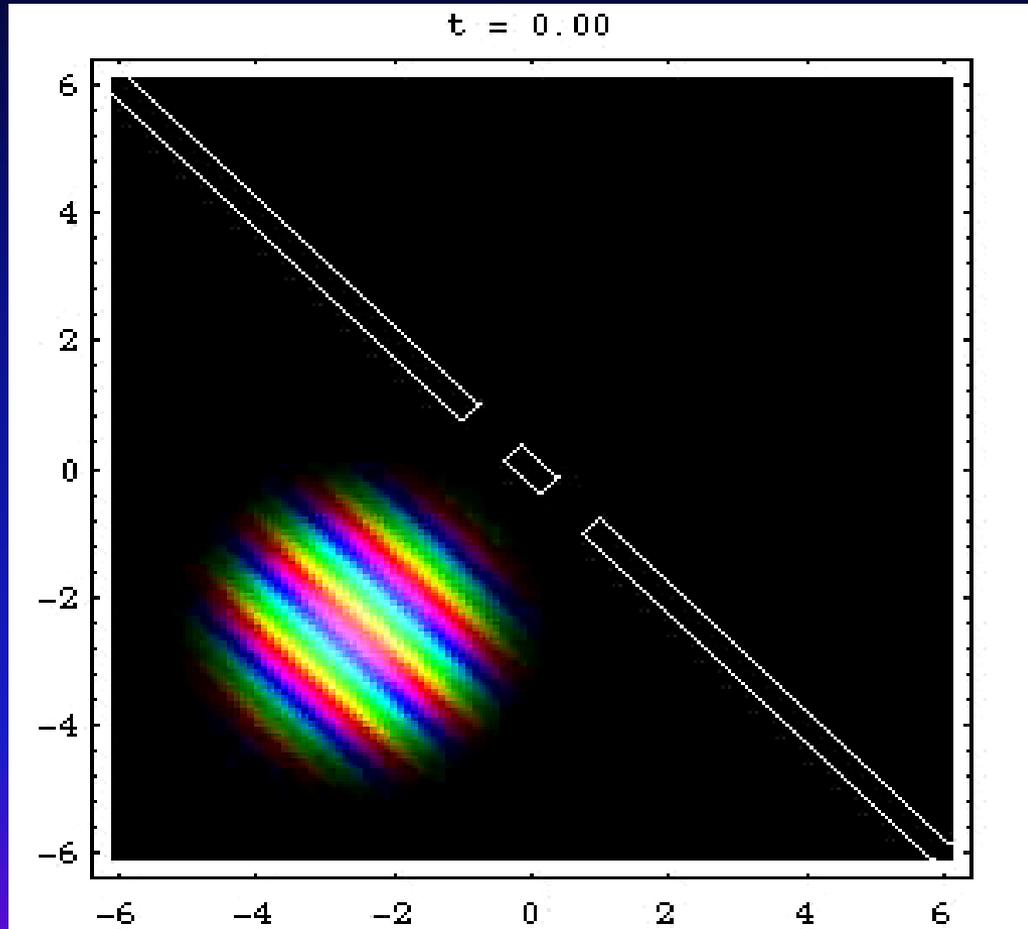
Die Fouriertransformierte eines gaussförmigen Wellenpaket mit Standardabweichung σ ergibt im Impulsraum wieder einen Gaussform, jedoch mit Standardabweichung $1/\sigma$!

Unschärferelation im Phasenraum



Phasenraumpunkt $[dx, dy, dz, dp_x, dp_y, dp_z]$ nicht beliebig genau zu bestimmen: $\Delta x \Delta p_x > \hbar$ $\Delta y \Delta p_y > \hbar$ $\Delta z \Delta p_z > \hbar$

Lösung der SG bei Streuung am Doppelspalt

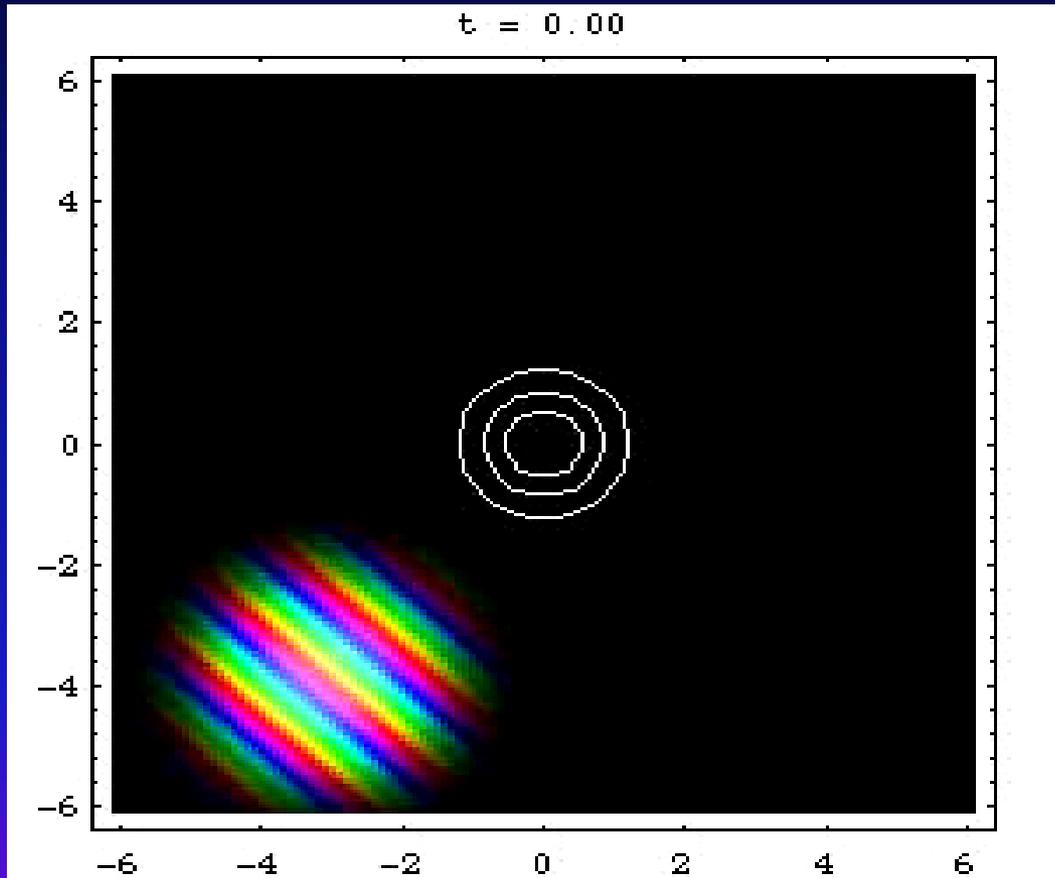


Teil der
Welle
reflektiert.

Anfang:

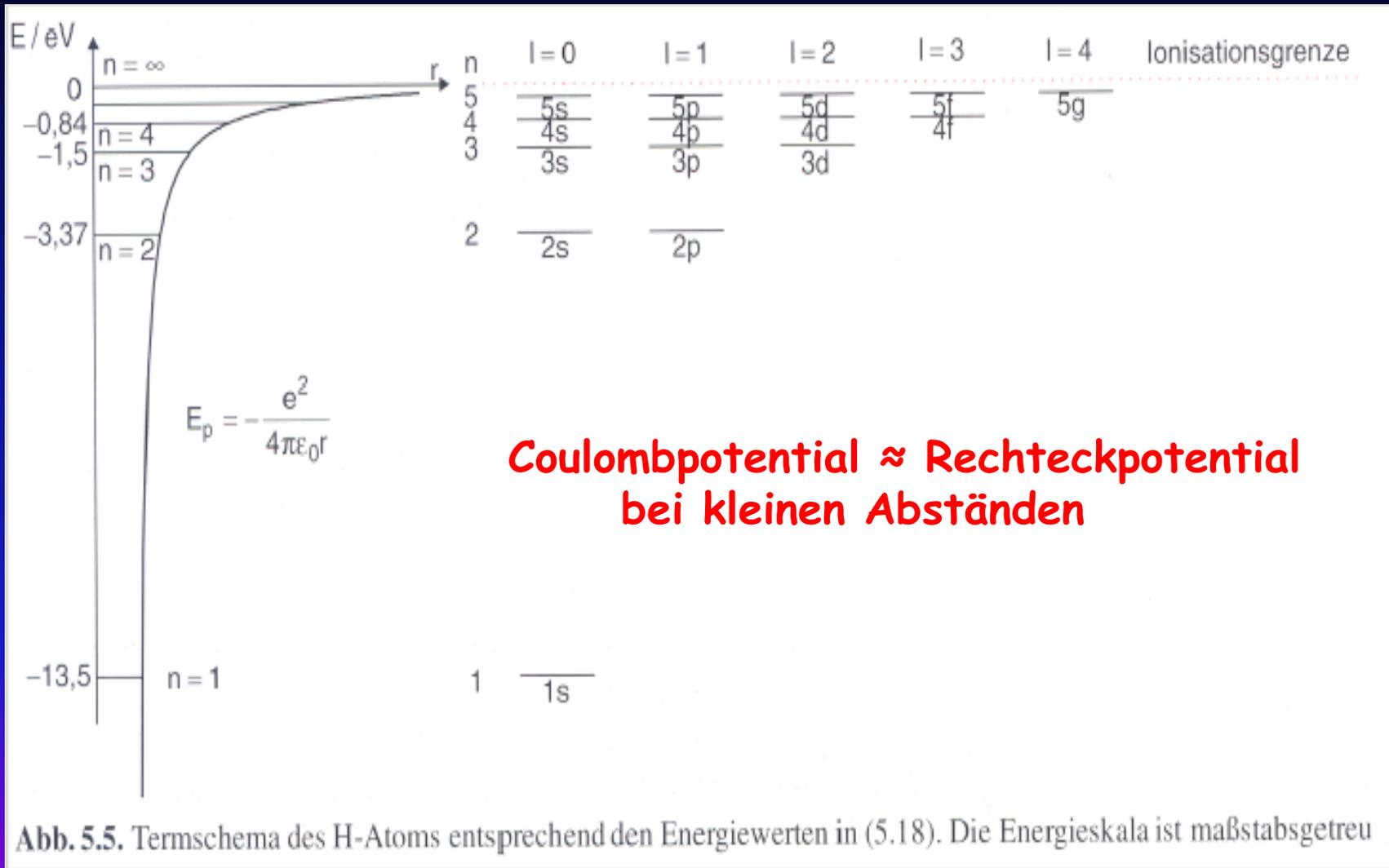
Gaussches
Wellenpaket

Lösung der SG bei Streuung an einem attraktiven Potentialwall



Streuung von
2 Teilchen
(Gaussche
Wellenpakete)
mit Impact-
parameter $\neq 0$

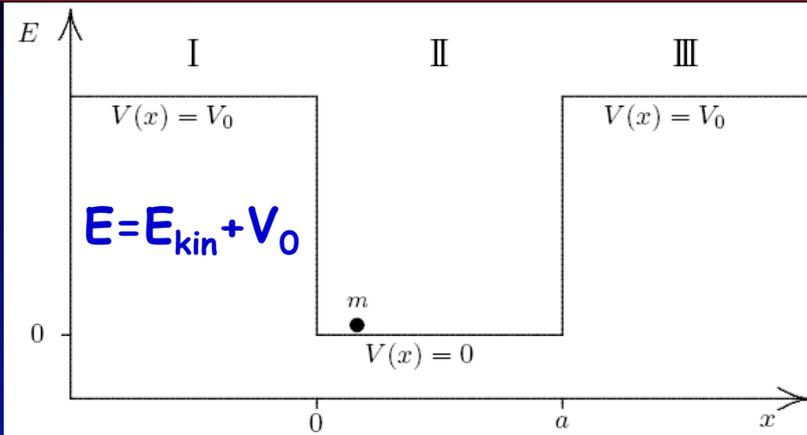
Lösung der SG in einem externen Potentialfeld



Coulombpotential \approx Rechteckpotential bei kleinen Abständen

Abb. 5.5. Termschema des H-Atoms entsprechend den Energiewerten in (5.18). Die Energieskala ist maßstabsgetreu

Lösung der SG für Teilchen in einem endlichen Potentialtopf (schwach gebundener Zustand)



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 & \text{(Bereich I)} \\ 0 & : 0 < x < a & \text{(Bereich II)} \\ V_0 & : a \leq x \leq \infty & \text{(Bereich III)} \end{cases}$$

$$E_{kin} = \begin{cases} E - V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 & \text{(Bereich I)} \\ E & : 0 < x < a & \text{(Bereich II)} \\ E - V_0 & : a \leq x \leq \infty & \text{(Bereich III)} \end{cases}$$

Ansatz: $\Psi(x, t) = u(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ \Rightarrow

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \Rightarrow$$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} u(x)$$

Lösung für I+III

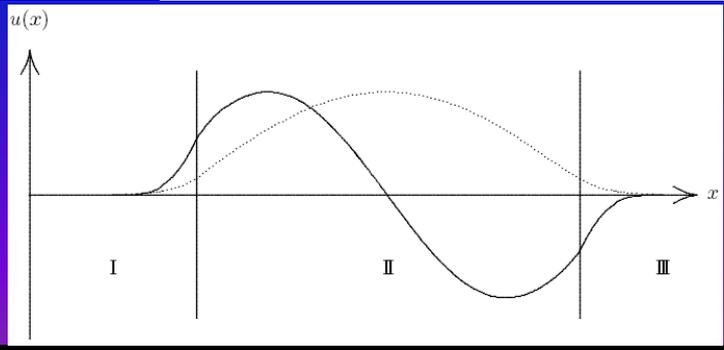
$$u_A(x) = Ae^{\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} x}$$

$$u_B(x) = Be^{-\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} x}$$

Lösung für II

$$u_C(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$$

$$u_D(x) = D \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$$



Quadratische Integrierbarkeit verlangt u_A für $x < 0$ und u_B für $x > 0$.
 Zusätzlich Stetigkeit der Lösung ergibt gezeichnete Lösung: AW max. im Topf, aber exp. abnehmend ausserhalb (=Tunneleffekt, klassisch nicht erlaubt!)

Lösung der SG für Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf (gebundener Zustand)

Bereich I : $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_A(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} A e^{\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} x} = 0$

Bereich III : $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_B(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} B e^{-\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} x} = 0$

$$u(x) = \begin{cases} 0 & : -\infty \leq x \leq 0 \quad (\text{Bereich I}) \\ u_C(x) + u_D(x) & : 0 < x < a \quad (\text{Bereich II}) \\ 0 & : a \leq x \leq \infty \quad (\text{Bereich III}) \end{cases}$$

Stetigkeit der Lösung verlangt:

$$u(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$$

mit Randbedingung

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = n\pi \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

oder

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

mit

$$u_n(x) = C \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Quantisierung der Energie durch Randbedingungen!

Bereich I: $\Psi(x, t) = 0$

Bereich II: $\Psi_n(x, t) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$
 $= C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} t\right)$

Bereich III: $\Psi(x, t) = 0$

n=1 entspricht Nullpunktenergie, die nicht unterschritten werden kann, auch bei T=0K. Nach Unschärferel. \Rightarrow Nullpunktsschwingungen

Für n=0

$$E_0 = \pi^2 \hbar^2 0^2 / 2ma^2 = 0$$

$\Rightarrow \Psi=0$, daher sinnlos, da Teilchen nicht vorkommt. $\rightarrow n > 0$, d.h. n=1, 2, 3....

Normierung der Wellenfunktion

Gesamtwellenfunktion:

Aus
$$\int_{-\infty}^0 0^2 dx + C^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx + \int_a^{\infty} 0^2 dx = 1$$

mit
$$\int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$$

folgt
$$0 + C^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin 2\frac{n\pi}{a}x}{4\frac{n\pi}{a}} \right]_0^a + 0 = 1$$

$$C^2 \left(\left(\frac{a}{2} - \frac{\sin 2\frac{n\pi}{a}a}{4\frac{n\pi}{a}} \right) - (0) \right) = 1$$

$$C^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{\sin 2n\pi}{4\frac{n\pi}{a}} \right) = 1$$

$$C^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{0}{4\frac{n\pi}{a}} \right) = 1$$

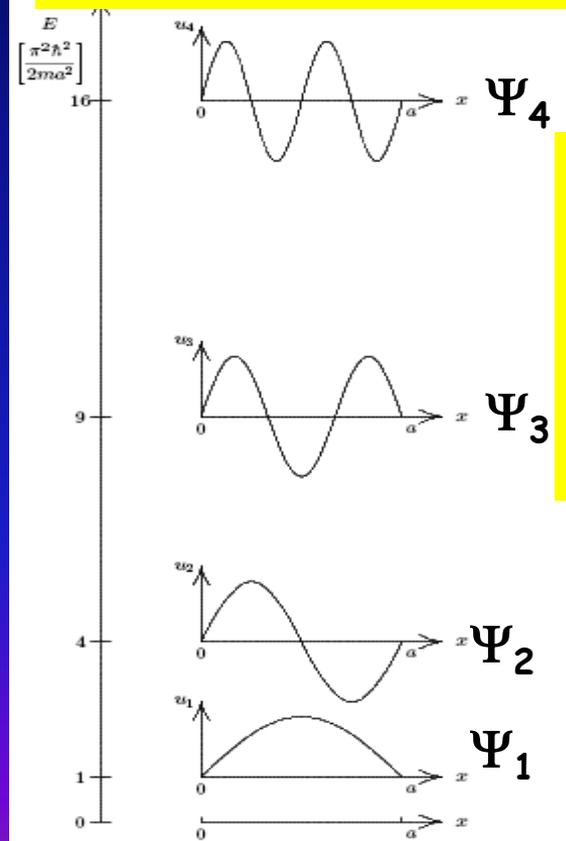
$$C^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$C^2 = \frac{2}{a}$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{i\hbar\pi^2 n^2}{2ma^2} t}$$

Realteil Ψ formt stehende Wellen



Amplitude der Wellenfkt. Ψ_n für diskrete Energieniveaus (Eigenfkt. der Energie)

Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

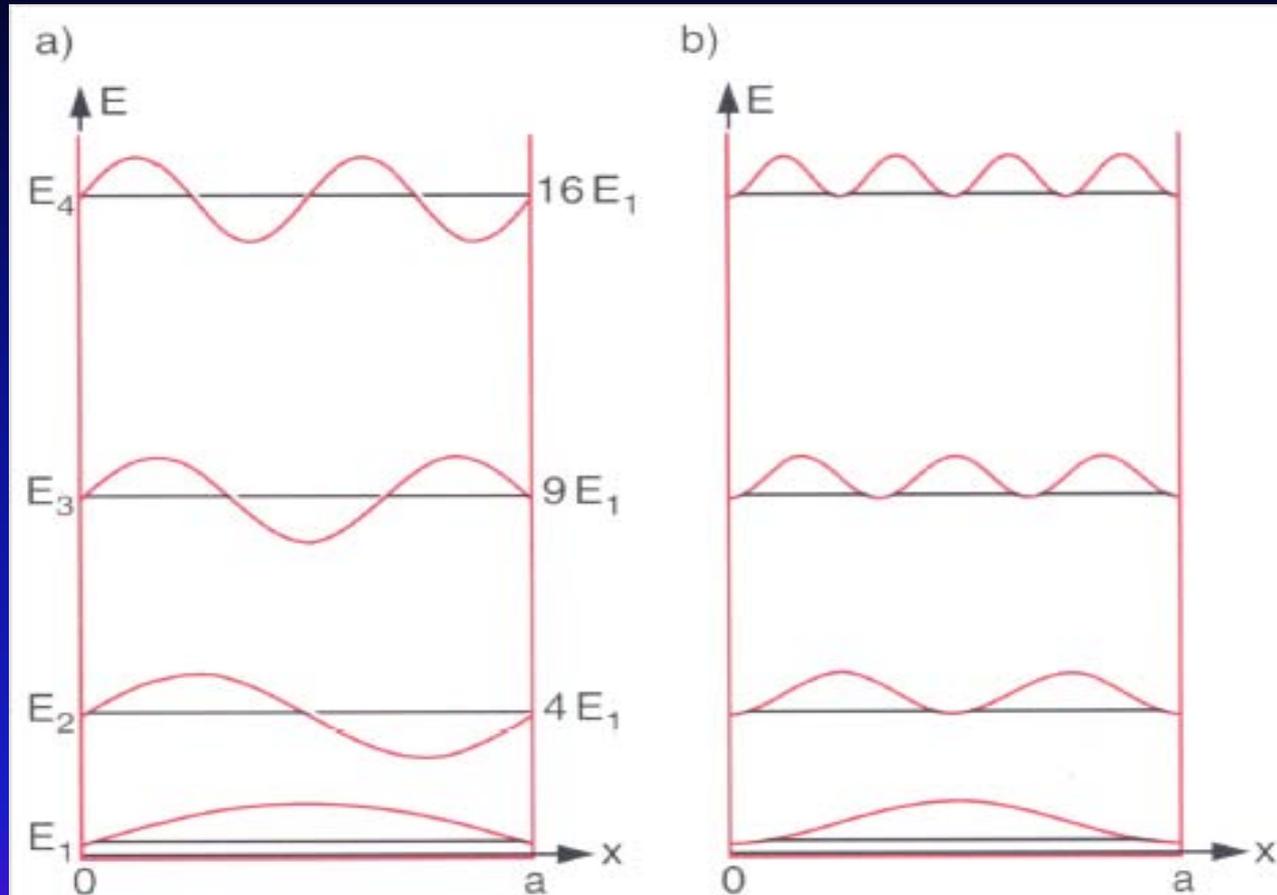


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens

Erlaubte Energieniveaus in unterschiedlichen Potentialkästen

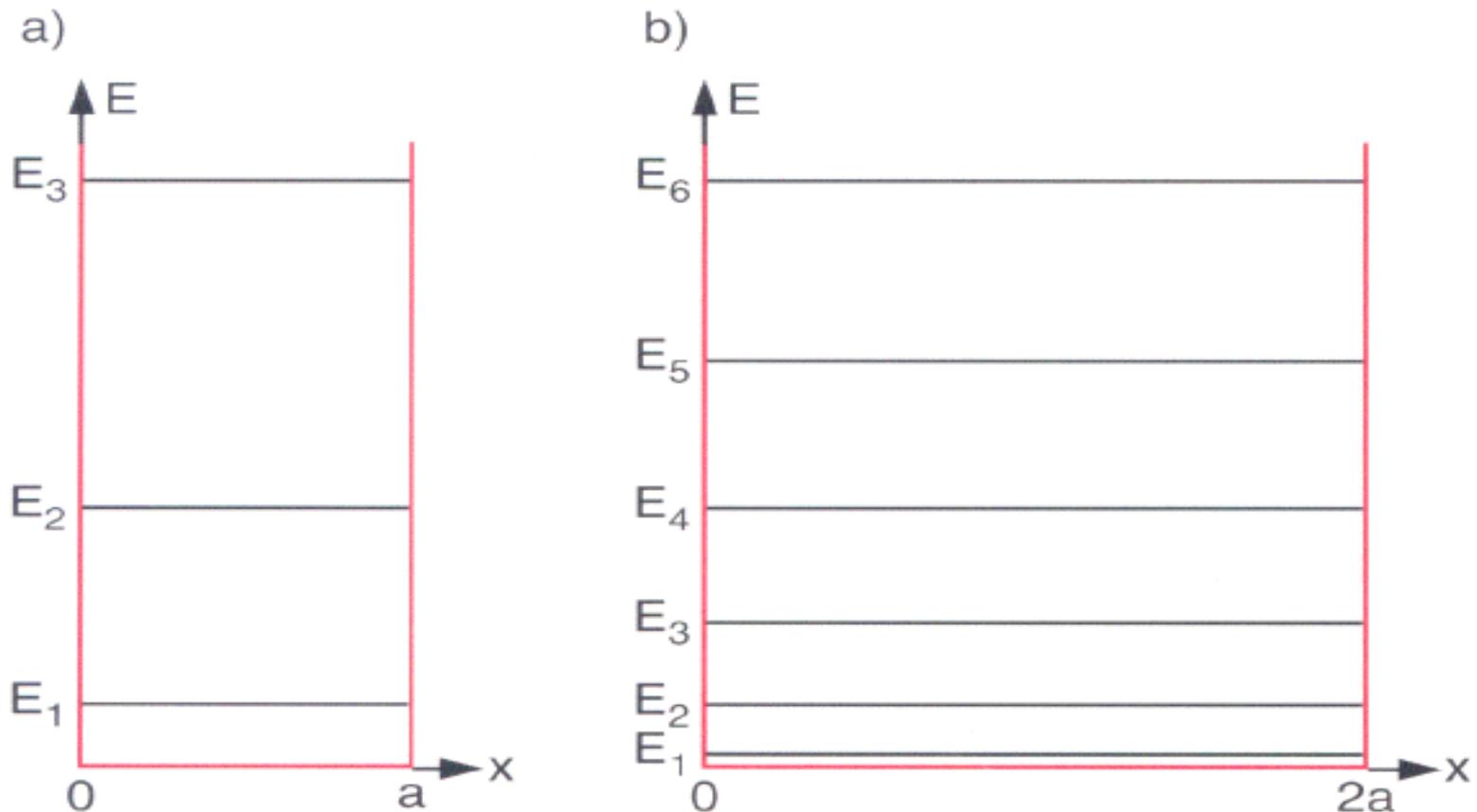


Abb. 4.17a,b. Vergleich der Energieniveaus in einem eindimensionalen unendlich hohen Potentialkasten der Breite (a) $\Delta x = a$, (b) $\Delta x = 2a$

Korrespondenzprinzip: $QM \Rightarrow KM$ für makroskopische Systeme

In Übereinstimmung mit der klassischen Vorstellung sind die beiden Bereiche I und III mit unendlich hohem Potential für das Teilchen absolut tabu.

Im Gegensatz zu den klassischen Vorstellungen gilt aber zweierlei:

1. Das Teilchen kann im gebundenen Zustand nicht beliebige Energiebeträge aufnehmen; es sind gemäß $n = 1, 2, 3, \dots$ nur bestimmte, scharfe Energiewerte erlaubt.
2. Es existiert eine **Nullpunktsenergie** bei $n = 1$, die nicht unterschritten werden kann, d. h., das Teilchen hat diese Energie auch beim absoluten Nullpunkt der Temperatur ($T = 0$ K) und kann (in Übereinstimmung mit HEISENBERG) damit natürlich niemals in Ruhe sein.

Der Abstand zwischen den erlaubten Energieniveaus E_n ist um so kleiner,

- je größer die Masse m und
- je größer der dem Teilchen zugestandene Raum, d. h. je größer die Topflänge a ist.

Das bedeutet, daß bei makroskopischen Körpern und/oder bei makroskopisch großen Potentialtöpfen (z. B. ein Gasbehälter mit einem Teilchen darin) die Energieniveaus so dicht aneinanderrücken, daß das quantenmechanische Ergebnis in das (scheinbare) Energiekontinuum der klassischen Mechanik übergeht.

Dies ist das Korrespondenzprinzip

Erwartungswert von x

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ gilt folgende Rechnung:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.35)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0x0 dx \\ &+ \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} dx \\ &+ \int_a^{+\infty} 0x0 dx \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\langle x \rangle = 0 + \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + 0 \quad (3.38)$$

Erwartungswert von x

Mit der trigonometrischen Umformung $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$ folgt aus Gleichung (3.38)

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \frac{1}{2} \int_0^a x \left[1 - \cos 2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right] dx \quad (3.39)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a \left(x - x \cos \frac{2n\pi}{a} x \right) dx. \quad (3.40)$$

In Integraltabellen findet man $\int x \cos bx dx = \frac{\cos bx}{b^2} + \frac{x \sin bx}{b}$. Damit läßt sich Gleichung (3.40) weiter vereinfachen:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} x^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{x \sin \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{2n\pi}{a}} \right]_0^a \quad (3.41)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} a^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{a \sin \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{2n\pi}{a}} - \frac{1}{2} 0^2 + \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + \frac{0 \sin \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{2n\pi}{a}} \right] \quad (3.42)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} a^2 - \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - 0 - 0 + \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + 0 \right] \quad (3.43)$$

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad (3.44)$$

Die Erwartung ist, dass der Mittelwert von x in der Topfmitte ist

Erwartungswert von p_x (1)

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.45)$$

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \\ &+ \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \right) dx \\ &+ \int_a^{+\infty} 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 - i\hbar \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx + 0 \quad (3.48)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left(\frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \quad (3.49)$$

Erwartungswert von p_x (2)

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (3.50)$$

In Integraltabellen findet man $\int \sin ax \cdot \cos ax dx = \frac{1}{2a} \sin^2 ax$, daraus folgt:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \left[\frac{1}{2\frac{n\pi}{a}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \quad (3.51)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{1}{a} \left(\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}a\right) - \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \right) \quad (3.52)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} (\sin^2(n\pi) - 0) \quad (3.53)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} 0 \quad (3.54)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (3.55)$$

Die Erwartung ist, dass der Mittelwert von p_x 0 ist, d.h. Teilchen hat mit gleicher Wahrscheinlichkeit ein Impuls nach links oder nach rechts.

Zum Mitnehmen

Teilchencharakter der Strahlung führt zu Störungen bei der Beobachtung

Die Störungen können berechnet werden wenn man die Teilchen als Wellenpakete annimmt. Dies führt zur Unsicherheitsrelation.

Die Wellenfunktion eines Teilchens gehorcht der Schrödingergleichung

Die beobachtbaren Zustände sind Eigenfunktionen der S_G und die Messungen entsprechen der Eigenwertgleichung: $\hat{O}|\Psi\rangle = o|\Psi\rangle$
Hier ist \hat{O} ein Operator, der den "Kollaps" der Wellenfkt. auf eine Eigenfunktion herbeiführt und o ist der Messwert.

Nicht-kommutierende Operatoren entsprechen Observablen, die man nicht gleichzeitig scharf messen kann und die Wellenfkt. sind nicht gleichzeitig Eigenfunktionen dieser Observablen.

Zum Mitnehmen

Die Randbedingungen der SG führt zur Quantisierung der Energien

Klassische Zustände sind immer Überlagerungen von vielen Eigenzuständen.

Es gibt eine niedrigste Energie für jedes Quantensystem $\neq 0$, weil ansonsten die AW 0 wird. Dies entspricht eine Impulsunschärfe und dementsprechend eine Ortsunschärfe \Rightarrow Nullpunktsschwingungen (auch bei absoluter Temp. = 0!)