

6. Wo stehen wir ?

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

bisher: freier Raum \rightarrow heute:

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

- Bornsche Interpretation:

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

bei Ausführung vieles Messungen \rightarrow nicht deterministisch

a) Mittlung d. Aufenthaltorts

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

b) Suche weiter Mittelwert

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

- Formulierung f. $F(\vec{r}, \vec{p} = ?)$ \rightarrow Operatorbegriff

- Einwirkung v. Potentialkräften auf ψ

- Theorie der Messung \rightarrow hermitesche Operatoren (II)

7. Einfach Operatoren im Ortsraum

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

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} \rangle &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \psi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \psi(\vec{p}, t) \quad \text{in symmetrischer Schreibweise} \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{p} \int d^3r' e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'/\hbar} \psi(\vec{r}', t) \end{aligned}$$

*

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

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

$$\boxed{\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{r'} \psi(\vec{r}, t)} \quad \text{Erwartungswert d. Impuls in Ortsraum}$$

Impulsoperator: $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{r'} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ „Impulsoperator“ im Ortsraum

Operator: weil $\vec{\nabla}_{r'}$ wirkt auf $\psi(\vec{r}', t)$

Operator Schema der QM: $\vec{p} \rightarrow \hat{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
 klassisch Operator

7.2. Weg zum Hamiltonoperator

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

a) Impuls: $\vec{p} \rightarrow \hat{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ „Impulsoperator“

b) Ort: $\vec{r} \rightarrow \hat{r} = \vec{r}$ „Ortoperator“

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

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

\underline{T} bestimmt die rechte Seite der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \underline{T} \psi \quad \rightarrow \text{Koppl. der Kraftgewinnwirkung durch Potential } V$$

d) Hamiltonfunktion

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

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

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \underline{H}(\vec{r}, \vec{p}, t) \psi(\vec{r}, t)}$$

Interpretation, „ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ “ Energieoperator

f) Beispiele f. Hamiltonoperatoren:

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

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

iii) Teilchen im elektromagnetischen Feld: \vec{A}, ϕ , Ladung q

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

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

iv) Vielteilchenproblem mit Coulombwechselwirkung: ($i \dots N$ Teilchen)

$$\underline{H} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_i} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

8 Dynamik der Wellenfunktion in Potentials

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

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

Anwendung:

a) stationären Potential $V(\vec{r})$: Atom-Coulombkernpotential

Tunneleffekt, Alpha zerfall

Einfluss v. Feld in Halbleitersystemen

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

Lichtemission

Radiationstrahlung

c) Dissipation durch System-Bad koppel, das \underline{V} beschreibt

8.1 Stationären Potentiale

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

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

Ausatz: Separation ansatz: $\psi(\vec{r}, t) = f(t) \varphi(\vec{r})$

$$[i\hbar \partial_t f(t)] \varphi(\vec{r}) = \underbrace{H(\vec{r}, \vec{p})}_{\text{H}} f(t) \varphi(\vec{r})$$

$$\int \frac{i\hbar \dot{f}(t)}{f(t)} = \underbrace{\left[\frac{H \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} \right]}_{\text{unver.}} = \text{konst.} = E \quad \text{Separationskonstante}$$

unver. von t abhängig! (*)
unver. von \vec{r} abhängig! (**)
unver. von \vec{r} und t abhängig!

Beweis:

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

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

Zeitunabhängige / stationäre Schrödingergleichung

≙ Eigenwertproblem mit Eigenwert E und Eigenfunktion φ :

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

Jeder n nummeriert die Lösung φ_n : Quantenzahl

ii) Vorgriff auf Eigenschaften von φ_n, E_n :

- Eigenwerte E_n werden reell sein \rightarrow mögl. Messwerte der Energie

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

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

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

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

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

c) Interpretation von E_n :

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

$$\underbrace{\int d^3\vec{r} \varphi_n^*(\vec{r}) H \varphi_n(\vec{r})}_{\text{Erwartungswert d. Energie}} = E_n \underbrace{\int d^3\vec{r} \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r})}_1$$

E_n ist die Energie d. stationären Zustands.

d) Gesamtlösung:

alle $\varphi_n(\vec{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$ sind konstruierte Einzelösungen

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

$\hat{=}$ Entwicklung nach vollständigem Funktionen system

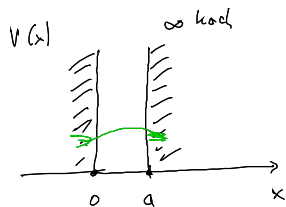
Au f. ang. Randproblem: $\psi(\vec{r}, t=0) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$, um zu f. Bestimmung der c_n 's:

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

c_n 's sind damit bestimmt.

8.2. Beispiel: stationäre Zustände f. unigeneraler Teilchen

1D unidimensionales Potential $V(x)$



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

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

$$\Downarrow \text{Randbedingungen } \varphi(a) = 0 = \varphi(0)$$

inca: für 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: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Randbedingf.: $\varphi(0) = B \stackrel{!}{=} 0$, $\varphi(a) = A \sin(ka) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow k = \frac{u\pi}{a}$; $u = 1, 2, 3, \dots$

↓ Eigenfunktionen und Eigenwerte eines Teilchens in einem Kasten:

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

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

c) Darstellung der Wellenfkt. und Energien

