21.04
Theo-VL

III Eigenfkt. der Energie

In der Quantenmechanik spielt die Zeit t (und die Energie E) eine besondere Rolle.

t: ist ein <u>Parameter</u> (im Gegensatz zu $\hat{r}$, $\hat{p}$, $\hat{L}$, ...).

$\hat{E}$: konjugierte zu t.

Schrödingergl.:

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

Hamiltonoperator:

Ortsraum

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

Energie und Hamiltonoperator sind verknüpft:

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

Energie ist eine Observable und Erwartungswert von $\hat{H}$.

Im folgenden: $\hat{H}$ ist nicht explizit zeitabhängig.

Eigenfunktionen erfüllen

$$\hat{H}\Psi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha \Psi_\alpha(\vec{r})$$

Ansatz:

stationäre Schrödingergl.:

$$\Psi_\alpha(\vec{r},t) = \Psi_\alpha(\vec{r})\, e^{-\frac{E_\alpha}{\hbar}t}$$

Zeitentwicklung der Eigenfunktion ist periodisch in der Zeit mit Kreisfrequenz $\omega = E/\hbar$

Die Eigenfkt. $\Psi_\alpha(\vec{r})$ bleibt eine Eigenfkt. zum selben Energieeigenwert $\forall t$.

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

$$= \int d^3r \, \Psi_\alpha^*(\vec{r}) e^{i\frac{E_\alpha}{\hbar}t} \hat{A} \Psi_\alpha(\vec{r}) e^{-i\frac{E_\alpha}{\hbar}t}$$

wenn $\hat{A}$ nicht zeitabhängig:

$$= \int d^3r \, \Psi_\alpha^*(\vec{r}) \hat{A} \Psi_\alpha(\vec{r})$$

Für Eigenzustände $\Psi_\alpha(\vec{r})$ sind die Erwartungswerte nicht explizit zeitabhängiger Operatoren konstant in der Zeit.

=> „Stationäre Zustände"

Konstruiere:

$$\Psi(\vec{r}, t=0) = \sum_\alpha c_\alpha \Psi_\alpha(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_\alpha c_\alpha e^{-i\frac{E_\alpha}{\hbar}t} \Psi_\alpha(\vec{r})$$

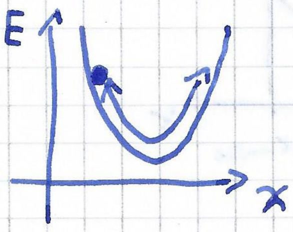
$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \left(\sum_\beta \left(e^{i\frac{E_\beta}{\hbar}t} c_\beta \Psi_\beta^*(\vec{r})\right) \hat{A} \sum_\alpha \left(e^{-i\frac{E_\alpha}{\hbar}t} c_\alpha \Psi_\alpha(\vec{r})\right) \right)$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} e^{-i(E_\alpha - E_\beta)/\hbar \, t} \int d^3r \, c_\beta^* \Psi_\beta^*(\vec{r}) A \, c_\alpha \Psi_\alpha(\vec{r})$$

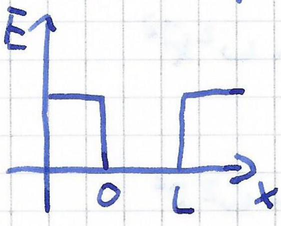
=> normalerweise ist der Erwartungswert zeitabhängig.

IV Einfache Systeme

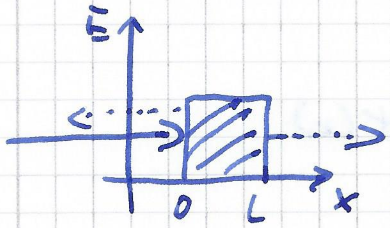
- Harmonischer Oszillator



- Potentialtopf

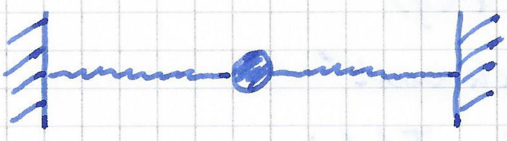


- Potentialbarriere



Quantenmechanischer harmonischer Oszillator

Erinnerung: klassische Mechanik:



Rückstellkraft:

$f = \varkappa(x - x_0)$

Potential: $V(x) = \frac{\varkappa}{2}(x-x_0)^2$

$F = -\vec{\nabla} V(x)$

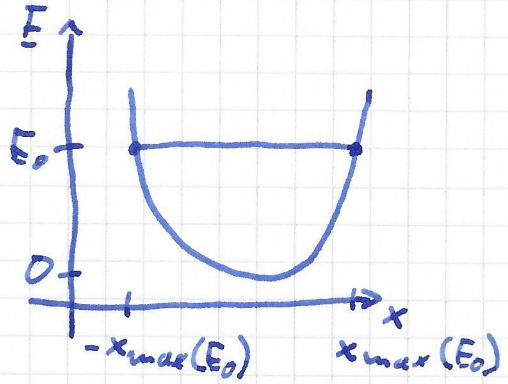
Klass. Beweg.gl.: $F = m\ddot{x}$

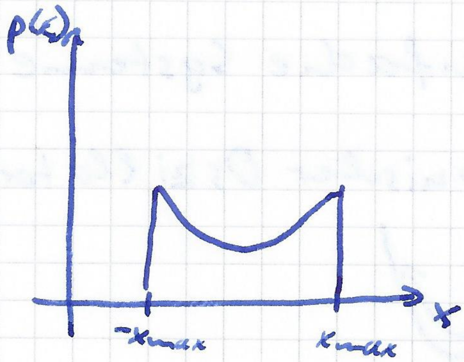
Gesamtenergie:

$$E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \underbrace{\frac{\varkappa}{2}}_{=:\frac{m}{2}\omega^2 \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{\varkappa}{m}}} x^2$$

$(x_0 = 0)$ Klass. Grundzustand $x = 0,\ \dot{x} = 0 \Rightarrow E = 0$

Bewegung: harmonische Schwingung mit Kreisfrequenz ω.





Quantenmechanik

Korrespondenzprinzip $\hat{V}(\hat{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$

$\hat{T}(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$

$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$

Stationäre Schrödingergl.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x \Psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x) = E\,\Psi(x)$$

Dimensionslose Variablen:

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}; \; y = \frac{x}{a}; \; a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \; \phi(y) = \Psi(x)\sqrt{a}$$

$\Rightarrow \frac{1}{2}(y^2 - \Delta_y)\,\phi(y) = \varepsilon\,\phi(y)$

„Lösungen sind wohlbekannt"

Lösungen sind Hermite-Fkt.:

$$\phi_n(y) = c_n e^{-y^2/2} H_n(y) \qquad c_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}$$

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}$$

$H_0(y) = 1$

$H_1(y) = 2y$

$H_2(y) = 4y^2 - 2$

$H_3(y) = 8y^3 - 12y$

Eigenwerte: $\varepsilon = n + 1/2$

Eigenenergien des harmonischen Oszillators:

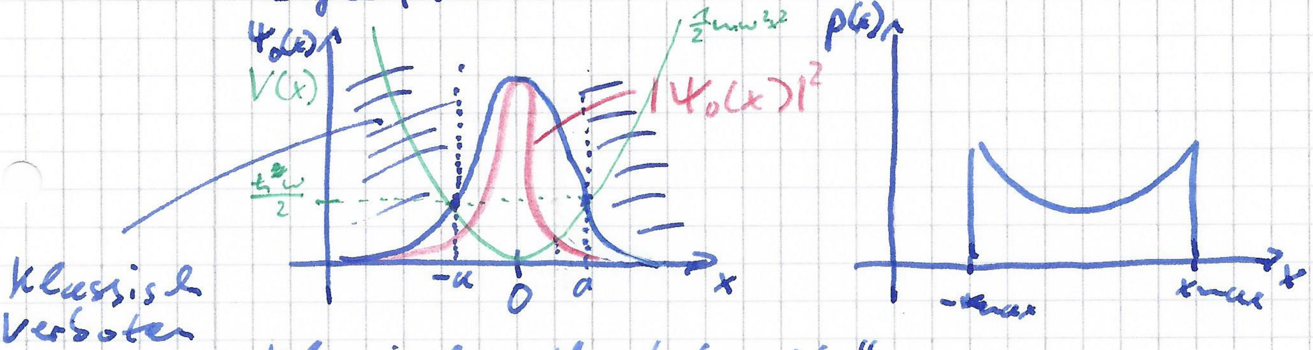
$$E_n = \hbar\omega(n+1/2)$$

Minimale Energie:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Energien sind quantisiert (diskret)

Eigenfkt.



„klassischer Umkehrpkt."

$$\hbar = m\omega x_{max}^2 \Rightarrow x_{max} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = a$$