

DIE ZEITUNABHÄNGIGE SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

* Wir haben also gesehen, daß

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x) \psi(x,t) \Rightarrow \text{zeitabhängige Schrödinger-Gleichung.}$$

* Wir suchen nun nach einer Lösung der Form:

$$\psi(x,t) = F(t) u(x) \Rightarrow \text{also wir spalten die Funktion von 2 Variablen (x,t) in 2 Funktionen einer Variable}$$

* Dann:

$$i\hbar u(x) \frac{dF(t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x) u(x) \right] F(t)$$

$$\text{Also } i\hbar \frac{1}{F(t)} \frac{dF(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x) u(x) \right]$$

Diese Gleichung kann nur erfüllt werden, wenn beide Seiten der Gleichung gleich eine Konstant E sind. Also:

$$i\hbar \frac{dF(t)}{dt} = E F(t) \longrightarrow F(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

↑
Konstant

und:

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

→ Diese ist die sogen. zeitunabhängige Schrödingers Gleichung

* Diese Gleichung ist eine sogen. Eigen^{wert}gleichung.

* Wir werden nun ganz kurz die Idee um Eigenwerte und Eigenfunktionen einführen.

Eigenwerte und Eigenfunktionen

- * Wir haben schon die Idee um Operator eingeführt, z.B. $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
- * Ein Operator bringt eine Funktion in eine andere Funktion

$$\hat{O} f(x) \longrightarrow g(x)$$

z.B. $\hat{O} f(x) = f(x)^2$

oder $\hat{O} f(x) = \frac{d}{dx} f(x) + c f(x)$

* Es gibt eine besondere Sort von Operatoren, die sogen. lineare Operatoren (nennen wir die als L) die erfüllen:

(i) $L [f_1(x) + f_2(x)] = L[f_1(x)] + L[f_2(x)]$

(ii) $L [c f(x)] = c L[f(x)]$ $c = \text{konstante}$

z.B. $\frac{d}{dx} f(x) + c f(x)$ ist linear, aber $f(x)^2$ ist nicht.

* Es gibt aber besondere Funktionen, die erfüllen daß für ein Operator \hat{O}

$$\hat{O} f(x) = \lambda f(x) \quad \text{wobei } \lambda \text{ ist eine konstante.}$$

* Diese Funktionen sind die Eigenfunktionen von \hat{O}

und die Konstanten (λ) sind die Eigenwerte.

* Der Hamilton Operator \hat{H} ist ein Beispiel von linearen Operator.

Die Eigenwerte E von \hat{H} heißen die Eigenenergien (da \hat{H} der Energie-Operator) ist. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist also, wie schon gesagt, eine Eigen Gleichung

$$E u_E(x) = \hat{H} u_E(x)$$

• Aus unserer ursprüngliche Diskussion, für Eigenfunktionen:

$$\psi(x,t) = F(t) u(x) \longrightarrow \boxed{\psi_E(x,t) = e^{-iEt/\hbar} \psi_E(x,t=0)}$$

Also die Eigenfunktionen des Hamilton-Operator ändern sich sehr einfach in der Zeit:

- (i) Die kriegen nur eine Phase $e^{-iEt/\hbar}$
- (ii) Also, $|\psi_E(x,t)|^2 = |\psi_E(x,t=0)|^2 \rightarrow$ Die assoziierte Dichte bleibt konstant.

MATHEMATISCHE NOTE: HERMITISCHE OPERATOREN

- Der Hamilton-Operator ist ein Beispiel von Hermiteschen Operator.
- Wir werden hier nicht alle Eigenschaften der Hermiteschen Operatoren studieren. Am wichtigsten für uns nun ist, daß für Hermiteschen Operatoren \hat{A} ist der Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{A} \psi(x)$$

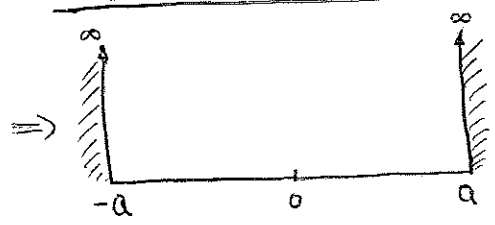
für jede mögliche $\psi(x)$ reell.

- Natürlich $\langle \hat{A} \rangle$ ist reell \rightarrow ist eine Energie. Also \hat{H} ist Hermitisch.
- Wir werden später ~~andere~~ andere Hermitesche Operatoren treffen.
- Zwei andere wichtige Eigenschaften der Hermiteschen Operatoren:
 - Eigenfunktionen $(\psi_1(x), \psi_2(x))$ mit verschiedenen Eigenwerte (λ_1, λ_2) sind orthogonal, also $\int \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = 0$
 - Die Eigenfunktionen eines Hermiteschen Operators sind komplett, also wir können alle andere Funktion als linear Kombination dieser Eigenfunktionen darstellen.

* Also, wir haben gesehen, daß der Hamilton-Operator \hat{H} bestimmte Eigenwerte (E) und Eigenfunktionen ($u(x)$) hat, und daß diese Funktionen und Werte durch die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gegeben werden.

* Wir werden nun ein Beispiel sehen: die "Potential-Kiste".

Nehmen wir: $V(x) = 0 \quad |x| < a$
 $= \infty \quad |x| \geq a$



* Da $V(x) = \infty$ für $|x| \geq a$, das bedeutet daß $u(x) = 0$ für $|x| \geq a$ (wir können kein Teilchen da finden, sonst wäre die Energie unendlich!).

Also $u(a) = u(-a) = 0 \implies$ Randbedingungen

* Innerhalb der Kiste $V(x) = 0$, also die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung wird:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = E u(x) \implies \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0$$

* Die Eigenenergien E müssen positiv sein. Sehen wir das. Sagen wir, daß $E < 0$. Sei $k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$. Dann

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - k^2 u(x) = 0 \implies u(x) = A e^{kx} + B e^{-kx}$$

Aber diese Lösungen können nicht die Randbedingungen erfüllen.

Also E muß positiv sein.

Sei $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \implies \frac{d^2 u}{dx^2} + k^2 u = 0 \implies$ Die Lösungen dieser Gleichungen sind: $\cos(kx)$
 oder $\sin(kx)$

* Nehmen wir die $\sin(kx)$ Lösungen. (Ungerade Funktionen)

$$u^{(-)}(x) = \sin kx \rightarrow u^{(-)}(a) = \sin ka = 0$$

Also $ka = n\pi$ wobei $n = 1, 2, 3, \dots$

$$u_n^{(-)}(x) = \sin\left[\frac{n\pi}{a}x\right] \cdot \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Deswegen
$$E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Wir schreiben $\frac{1}{\sqrt{a}}$, weil wir wollen $\int_{-\infty}^{\infty} |u_n^{(-)}(x)|^2 dx = 1$ (Normalisierung)

* Nehmen wir nun die $\cos(kx)$ Lösungen (gerade Funktionen)

$$u^{(+)}(x) = \cos kx \rightarrow u^{(+)}(a) = \cos ka = 0$$

Also $ka = (n - \frac{1}{2})\pi$ wobei $n = 1, 2, 3, \dots$

$$u_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{(n - \frac{1}{2})\pi x}{a}\right]$$

Deswegen
$$E_n^{(+)} = \frac{[n - \frac{1}{2}]^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

* Es ist einfach zu sehen, daß

$$\int_{-a}^a dx u_m^{(+)}(x) * u_n^{(+)}(x) = \int_{-a}^a dx u_m^{(-)}(x) * u_n^{(-)}(x) = \delta_{n,m}$$

$$\int_{-a}^a dx u_m^{(+)}(x) * u_n^{(-)}(x) = 0$$

Orthogonalität.
(Wir kennen schon, daß das ist eine Eigenschaft der Hermiteschen Operatoren)

* Also die Eigenenergien sind nicht etwas Kontinuierliches, sondern die nehmen diskrete Werte.

Die niedrigste Energie in der Kiste ist

$$E_1^{(+)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \Rightarrow u_1^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{\pi x}{2a}\right] \Rightarrow \text{Grundzustand}$$

* Aufpassen: die niedrigste Energie der Kiste ist nicht Null, wie man klassisch erwarten könnte. Das ist die sogenannte Null-punkt Energie. Die Idee der Null-punkt Energie ist sehr wichtig!

* Wie sieht's für den Impuls p in der Kiste aus?

* Wir haben schon gesehen, daß $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Also $\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \int_{-a}^a dx u^*(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x)$

* Die Eigenfunktionen der Kiste sind entweder gerade oder ungerade. Wenn $u(x)$ gerade ist, dann ist $\frac{\partial}{\partial x} u(x)$ ungerade, und umgekehrt.

Also $u^* \frac{\partial}{\partial x} u$ ist immer ungerade, also $\int_{-a}^a dx u^* \frac{\partial}{\partial x} u = 0$, also $\langle \hat{p} \rangle = 0$.

* Aber $\langle \hat{p}^2 \rangle = 2m E_n^{\pm}$

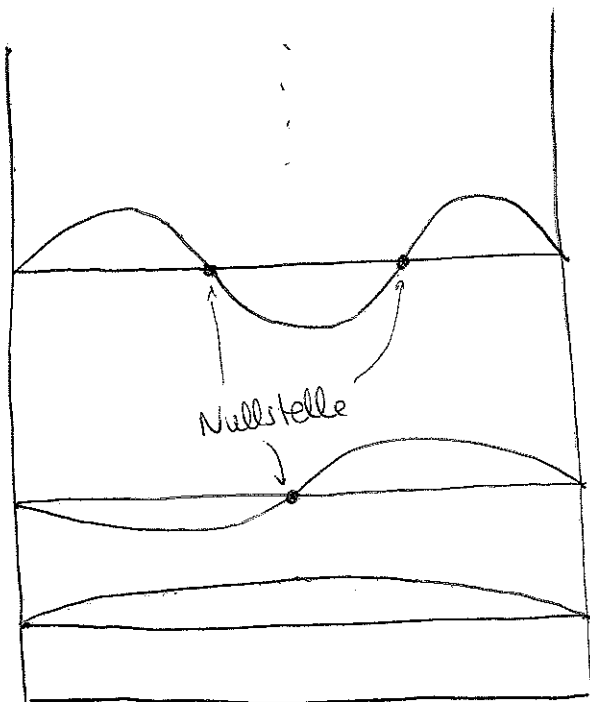
* Für den Grundzustand $\langle \hat{p}^2 \rangle = 2m E_1^+ = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4a^2}$

* Also die Varianz $\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} = \frac{\pi \hbar}{2a}$

* Die Ortsungenauigkeit ist $\Delta x = 2a$ (also die Breite der Kiste)

Also $\Delta x \cdot \Delta p = 2a \cdot \frac{\pi \hbar}{2a} = \pi \hbar > \hbar$ (Unschärferelation)

* Also die Moden der Kiste sehen so aus:



* Je größer die Anzahl von Nullstellen, je größer die Energie. Das ist klar, weil je größer die Krümmung ist, desto größer ist die kinetische

Energie:

$E_k \sim \frac{\partial^2}{\partial x^2} u$ (die 2. Ableitung) (bist die Krümmung)

* Also, wir kennen schon die Eigenfunktionen $[u_n^{(\pm)}(x)]$ und Eigenwerte $(E_n^{(\pm)})$ der Potentialkiste.

Alle andere Funktion $\psi(x)$, die die Randbedingungen $\psi(a)=\psi(-a)=0$ erfüllt, kann als Linearkombination der Eigenfunktionen von \hat{H} geschrieben werden (ich erinnere euch unsere Diskussion über Hermiteschen Operatoren).

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [A_n^{(+)} u_n^{(+)}(x) + A_n^{(-)} u_n^{(-)}(x)]$$

Wir werden nun diese Koeffizienten $A_n^{(\pm)}$ näher betrachten.

Zuerst, gegebene $\psi(x)$ und für bekannte Eigenfunktionen $u_n^{(\pm)}(x)$ wie bestimmen wir $A_n^{(\pm)}$. Ganz einfach, wir werden die Orthogonalität der Eigenfunktionen benutzen:

Orthogonalität der Eigenfunktionen

$$\int dx u_n^{(+)*} \psi(x) = \sum_{n'=1}^{\infty} \int dx \left\{ A_{n'}^{(+)} u_{n'}^{(+)}(x)^* u_{n'}^{(+)}(x) + A_{n'}^{(-)} u_{n'}^{(-)}(x)^* u_{n'}^{(-)}(x) \right\} \stackrel{\text{Orthogonalität}}{=} A_n^{(+)}$$

Hence
$$A_n^{(\pm)} = \int dx u_n^{(\pm)*} \psi(x)$$

* Es ist immer eine gute Idee die Funktionen $\psi(x)$ als Linearkombination von Eigenfunktionen zu schreiben, weil dann ist die Zeitabhängigkeit klar:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} [A_n^{(+)} u_n^{(+)}(x) e^{-iE_n^{(+)}t/\hbar} + A_n^{(-)} u_n^{(-)}(x) e^{-iE_n^{(-)}t/\hbar}]$$

* Wir werden nun versuchen, die physikalische Bedeutungen $A_n^{(\pm)}$ zu verstehen. Rechnen wir den Erwartungswert der Energie $\langle H \rangle$ für die Wellenfunktion $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) = \int dx \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n^{(+)*} u_n^{(+)*}(x) + A_n^{(-)*} u_n^{(-)*}(x) \right) \right\} \hat{H} \left\{ \sum_{n'=1}^{\infty} \left(A_{n'}^{(+)} u_{n'}^{(+)}(x) + A_{n'}^{(-)} u_{n'}^{(-)}(x) \right) \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \int dx \left\{ A_n^{(+)*} u_n^{(+)*}(x) + A_n^{(-)*} u_n^{(-)*}(x) \right\} \left\{ A_{n'}^{(+)} E_{n'}^{(+)} u_{n'}^{(+)}(x) + A_{n'}^{(-)} E_{n'}^{(-)} u_{n'}^{(-)}(x) \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[E_n^{(+)} |A_n^{(+)}|^2 + E_n^{(-)} |A_n^{(-)}|^2 \right] \end{aligned}$$

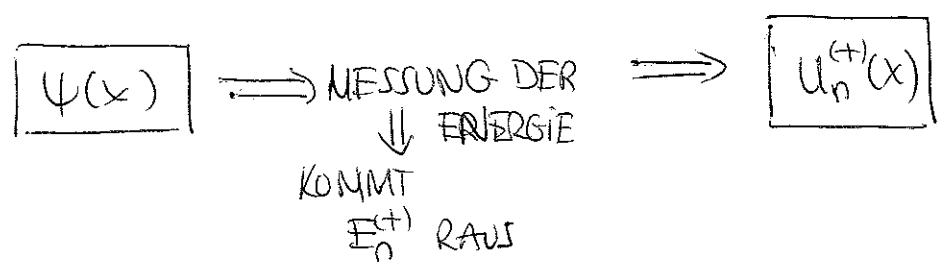
* Wir kennen auch, daß die Wellenfunktion normiert ist

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [|A_n^{(+)}|^2 + |A_n^{(-)}|^2]$$

* Also $|A_n^{(\pm)}|^2$ gibt uns die Wahrscheinlichkeit einer Energie $E_n^{(\pm)}$ zu messen.

* Wir würden $E_n^{(+)}$ mit 100% Wahrscheinlichkeit, wenn $\psi(x) = u_n^{(+)}(x)$ wäre. Das bringt uns zu einem wichtigen Punkt.

Sagen wir, daß wir $\psi(x)$ haben, und wir messen die Energie, und wir bekommen $E_n^{(+)}$. Wie ist die Wellenfunktion nach der Messung? Nach der Messung die Wellenfunktion wir in $u_n^{(+)}(x)$ projiziert:



Natürlich, später alle andere Messung der Energie gibt (nun mit 100% Wahrscheinlichkeit) $E_n^{(+)}$.

* Wie schon gesagt die Idee von Eigenwerte und Eigenfunktionen betrifft nicht nur \hat{H} sondern alle andere Operatoren.

Wir werden nun 2 andere Operatoren studieren

- Paritäts-Operator (\hat{P})
- Impuls-Operator (\hat{p})

• Paritäts-Operator

* Wir haben die Eigenfunktionen der Potentialkasten in 2 Gruppen unterteilt: gerade Funktionen $u^{(+)}(x) = u^{(+)}(-x)$, und ungerade Funktionen $u^{(-)}(x) = -u^{(-)}(-x)$. Wir wenden nun die Idee von Parität formalisieren. Die Parität (und in allgemeineren alle Symmetrien) ist ^{eine} ziemlich wichtige Eigenschaft.

* Wir führen nun den Paritäts-Operator ein:

$$P\psi(x) = \psi(-x)$$

Für gerade Funktionen

$$P\psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(-x) = \psi^{(+)}(x)$$

Für ungerade Funktionen

$$P\psi^{(-)}(x) = \psi^{(-)}(-x) = -\psi^{(-)}(x)$$

Also die gerade Funktionen sind Eigenfunktionen von P mit Eigenwert $+1$, und die ungerade Funktionen ebenfalls, aber mit Eigenwert -1 .

* Also (und das ist wichtig) die Funktionen $u^{(\pm)}(x)$ sind gleichzeitig Eigenfunktionen von \hat{H} und von \hat{P} .

* Eigentlich ± 1 sind die einzig möglichen Eigenwerte von P , da $P^2\psi(x) = P(\lambda\psi(x)) = \lambda^2\psi(x)$, aber $P^2\psi(x) = P\psi(-x) = \psi(x)$ also $\lambda^2 = 1$, also $\lambda = \pm 1$.

* Eigentlich eine beliebige Funktion $\psi(x)$ kann als Superposition von einer geraden und einer ungeraden Funktion:

$$\psi(x) = \underbrace{\frac{1}{2} [\psi(x) + \psi(-x)]}_{\uparrow \text{gerade}} + \frac{1}{2} [\psi(x) - \psi(-x)]$$

(Wie schon gesagt, die Eigenfunktionen eines hermiteschen-Operators bilden einen vollständigen Satz von Funktionen)

• Was passiert mit der Parität einer Funktion in der Zeit?

Anders ausgedrückt, wenn $\psi(x, t=0)$ eine definierte (gerade oder ungerade) Parität hat, hat auch $\psi(x, t)$ dieselbe definierte Parität?

Das hängt von der Symmetrie von \hat{H} , also von der Symmetrie des Potentials $V(x)$.

• Sehen wir das.

Die Schrödinger-Gleichung sagt uns, daß:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$$

Das bedeutet, daß $V(x) = V(-x)$
Der \hat{H} -Operator ist symmetrisch

Also $\hat{P} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} \psi(x, t) = \hat{P} \hat{H} \psi(x, t)$

Wenn $[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \implies \hat{P} \hat{H} = \hat{H} \hat{P} \implies i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{P} \psi) = \hat{H} (\hat{P} \psi)$

Also, nehmen wir die gerade Funktion $\psi_{(x,t)}^{(+)} = \frac{1}{2} (1 + \hat{P}) \psi(x, t)$
und $\psi_{(x,t)}^{(-)} = \frac{1}{2} (1 - \hat{P}) \psi$ (ungerade).

Dann $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(x,t)}^{(+)} = \psi_{(x,t)}^{(+)}$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(x,t)}^{(-)} = \psi_{(x,t)}^{(-)}$

* Also Funktionen verschiedener Parität werden nicht miteinander.
Also die Parität bleibt konstant.

* Wir werden sehen (später), daß diese wichtige Bedingung ganz allgemein ist. Wenn ein Operator \hat{O} erfüllt $[\hat{H}, \hat{O}] = 0$, dann bleiben die Eigenwerte von \hat{O} konstant in der Zeit.

Das ist eine sehr wichtige Eigenschaft!

• Impuls-Operator

• Wir werden nun die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Impulsoperators diskutieren.

* In x -Darstellung: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

* Die Eigenwertgleichung für \hat{p} ist

$$\hat{p} u_p(x) = p u_p(x)$$

also $-i\hbar \frac{d}{dx} u_p(x) = p u_p(x) \implies \frac{du_p}{u_p} = +i p / \hbar dx$

und deswegen: $u_p(x) = C e^{ipx/\hbar}$

wobei C eine Konstante ist

• Diese Funktionen erfüllen:

$$\int dx u_{p'}^*(x) u_p(x) = |C|^2 \int dx e^{i(p-p')x/\hbar} = 2\pi |C|^2 \hbar \delta(p-p')$$

Um zu normalisieren $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

- Also $u_p(x) = \frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

- Die Eigenwerte von \hat{p} bauen kein diskreter Satz von Werten, sondern ein kontinuierliches Spektrum.

Deswegen, anstatt eine lineare Kombination (wie für's Kasten) haben wir, daß eine beliebige Funktion $\psi(x)$ als ein Integral geschrieben werden kann:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

← Also die Relation zwischen x - und p -Darstellung die wir schon kennen.

- In freiem Raum $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Ganz klar $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, also p bleibt konstant in freiem Raum \implies wir mischen die verschiedenen p 's nicht miteinander. p ist "gut definiert" in freiem Raum.

* NOTE über Hermitesche Operatoren die kommutieren.

* Sei \hat{A} und \hat{B} Hermitesche Operatoren
und $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

* Ich werde nun zeigen, daß wenn die Eigenwerte sind alle verschieden voneinander, dann die Eigenfunktionen von \hat{A} sind auch Eigenfunktionen von \hat{B} .

* Sei ψ eine Eigenfunktion von \hat{A} : $\hat{A}\psi = a\psi$

$$\text{Dann } \left. \begin{array}{l} \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(a\psi) = a\hat{B}\psi \\ \hat{A}\hat{B}\psi \end{array} \right\} \text{ Also } \hat{A}(\hat{B}\psi) = a(\hat{B}\psi)$$

* Also $\hat{B}\psi$ ist auch eine ~~Eigen~~ Eigenfunktion von \hat{A} mit Eigenwert a .

Da die Eigenvektoren mit verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal, dann muß $\hat{B}\psi$ ein Vielfaches von ψ

also $\hat{B}\psi = b\psi$, und damit ψ ist ebenfalls eine Eigenfunktion von \hat{B} .

* Man kann auch beweisen, daß wenn \hat{A} und \hat{B} dieselben Eigenfunktionen haben, dann auf jedenfall $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

sehen wir das:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(b\psi) = b(\hat{A}\psi) = ba\psi = b\hat{A}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi \rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$