

Zeitentwicklung einer Wellenfunktion

Hier: HamiltonOp. \hat{H} zeitunabhängig (s. Seite 22)

- ▶ ZeitentwicklungsOp. $\hat{U}(t, t_0)$
 $\{|u_n\rangle\}$: EV von \hat{H} : $\hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle & (|\psi(0)\rangle &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | \psi(0)\rangle) \\ &= \sum_n |u_n\rangle e^{-itE_n/\hbar} \langle u_n | \psi(0)\rangle \end{aligned}$$

OrtsWellenfunktion

$$\psi(x, t) = \sum_n \alpha_n e^{-itE_n/\hbar} u_n(x) \quad \text{mit } \alpha_n = \langle u_n | \psi(0)\rangle$$

- ▶ Propagator $G(x, t; x', t_0)$ (Greenfunktion der Schrödinger-Gl.)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &:= \langle x | \hat{U}(t, 0) | \psi(0)\rangle \\ &= \int dx' \langle x | \hat{U} | x'\rangle \langle x' | \psi(0)\rangle \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \int dx' G(x, t; x', 0) \psi(x', 0) \\ &\text{mit } G(x, t; x', 0) = \sum_n u_n^*(x') u_n(x) e^{-itE_n/\hbar} \end{aligned}$$

- ▶ Beispiel: Zeitentwicklung freier Teilchen (s. Seite 32; Aufgabe 12)
auch im Heisenberg-Bild

Einfache Modellsysteme

Im Folgenden betrachten wir einfache Systeme, beschrieben durch den Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

- ▶ Harmonischer Oszillator: Teilchen in einer Parabel $V(x) \sim x^2$
 - ▶ Anwendungen: Molekylvibration, Gitterschwingung, EM-Feld...
- ▶ Potentialtopf, Potentialbarriere
 - ▶ Näherung einer kurzreichweitigen Wechselwirkung
 - ▶ Resonanzen
 - ▶ Tunneleffekt
- ▶ Periodisches Potential: Energiebänder (Aufgabe 19)

Rezept:

- (1) Lösungen der Energie-Eigenwertgl. (der stationären SchrödingerGl.)
⇒ Eigenwerte(EW) E_n und Eigenfunktionen(EV; stationäre Zustände) u_n
 - (2) Entwicklung nach u_n für eine beliebige Wellenfunktion $\psi(t_0)$
 - (3) Zeitentwicklung mittels $\hat{U}(t, t_0)$
im SchrödingerBild: $\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \hat{U}\psi(t_0) | \hat{A} | \hat{U}\psi(t_0) \rangle$
im HeisenbergBild: $\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi(t_0) \rangle$
- * Manchmal ist es einfacher, die Probleme in der Impulsdarstellung zu lösen

Harmonischer Oszillator: analytische Methode

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

Dimensionslose Größen: $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $\lambda = \frac{2}{\hbar\omega}E$

Eigenwertgl. in der x -Darstellung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x\right)\tilde{u}(x) = E\tilde{u}(x) \implies \frac{d^2u}{dq^2} + (\lambda - q^2)u = 0$$

Lösungsansatz $u(q) = h(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}$

$$h''(q) - 2qh'(q) + (\lambda - 1)h(q) = 0 \quad (*)$$

Potenzreihenansatz

$$h(q) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_{\nu} q^{\nu} \xrightarrow[\text{Koeffizientenvergleich}]{(*)} \alpha_{\nu+2} = \frac{2\nu + 1 - \lambda}{(\nu + 2)(\nu + 1)} \alpha_{\nu}$$

Zulässige Lösungen: Hermite-Polynome $h(q)$ vom Grad $n \geq 0$ (mit $\lambda = 2n + 1$)

$$\text{EW : } E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{EV : } u_n(q) = \begin{cases} \alpha_0 + \alpha_2 q^2 + \alpha_4 q^4 + \dots + \alpha_n q^n \\ \alpha_1 + \alpha_3 q^3 + \alpha_5 q^5 + \dots + \alpha_n q^n \end{cases} \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

mit $n = 0, 1, 2, \dots$

Harmonischer Oszillator: algebraische Methode

- ▶ Dimensionslose Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \\ \hat{P} &= \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p} \end{aligned} \xrightarrow{\text{def.}} \begin{cases} \hat{a} = \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} & \text{VernichtungsOp.} \\ \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} & \text{ErzeugungsOp.} \end{cases}$$
$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I} \implies [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$$

- ▶ HamiltonOp.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \implies \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

- ▶ Eigenschaften von \hat{a} , \hat{a}^\dagger und $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ (BesetzungszahlOp.):

$$\begin{aligned} \hat{N}|n\rangle &= n|n\rangle; & \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle; & \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ & & & & \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

- ▶ EW-Problem von \hat{H}

$$\text{EW : } \hat{E}_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \text{EV : } \begin{cases} \hat{a}|0\rangle = 0 \xrightarrow{\langle x|0\rangle = u_0(x)} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) u_0(x) = 0 \\ \langle x|n\rangle = \langle x| \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \end{cases}$$

Harmonischer Oszillator: EnergieEigenfunktionen

- ▶ Die Wellenfunktion des Grundzustands $\hat{a}u_0 = 0$:

$$u_0(x) = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad \text{mit } x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

erfüllt die minimale x - p Unschärferelation $\Delta_x \cdot \Delta_p = \frac{\hbar}{2}$

- ▶ Angeregte Zustände $u_n(x)$ mit $n > 0$:

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n u_0(x)$$

oder

$$u_n(x) = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} h_n\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (h_n(q) : \text{Hermite-Polynome})$$

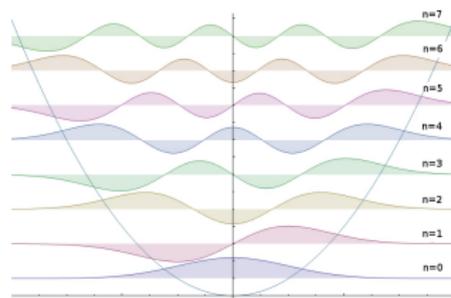


Fig: Wikipedia (modified)

Die Eigenfunktion des n -ten Zustandes

- ▶ hat n Nullstellen
- ▶ ist gerade für gerade n , und ungerade für ungerade n .

Harmonischer Oszillator: Zeitentwicklung

Nützliche Formel (Baker-Hausdorff-Formel): (Aufgabe 14(c))

$$e^{i\hat{B}t}\hat{A}e^{-i\hat{B}t} = \hat{A} + it[\hat{B}, \hat{A}] + \frac{(it)^2}{2!} [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \dots \quad (t \in \mathbb{R})$$

$$\hat{x}(0) = \hat{x}_0, \hat{p}(0) = \hat{p}_0$$

$$[\hat{H}, \hat{x}_0] = -\frac{i\hbar\hat{p}_0}{m}, \quad [\hat{H}, \hat{p}_0] = i\hbar m\omega^2\hat{x}_0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{x}(t) = \hat{x}_0 \cos \omega t + \left(\frac{\hat{p}_0}{m\omega}\right) \sin \omega t \\ \hat{p}(t) = -m\omega\hat{x}_0 \sin \omega t + \hat{p}_0 \cos \omega t \end{cases}$$

$\langle \hat{x}(t) \rangle$ und $\langle \hat{p}(t) \rangle$ in einem EnergieEigenzustand $|n\rangle$:

$$\langle n|\hat{x}(t)|n\rangle = 0, \quad \langle n|\hat{p}(t)|n\rangle = 0 \quad (\text{keine Oszillationen!})$$

$\langle \hat{x}(t) \rangle$ und $\langle \hat{p}(t) \rangle$ in einem **kohärenten Zustand** (d.h. EV von \hat{a}) haben dieselbe Zeitabhängigkeit wie die klassische Schwingung. (Aufgabe 16)

Harmonischer Oszillator in d Dimensionen

HamiltonOp. eines isotropen harmonischen Oszillators in d -Dim.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \dots + \hat{p}_d^2) + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \dots + \hat{x}_d^2) \\ &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_d\end{aligned}$$

Die Lösung der EW-Gl. von \hat{H}_i in 1D ist bekannt:

$$\hat{H}_i u_i = E_i u_i \quad \text{mit} \quad E_i = \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right), \quad n_i = 0, 1, 2, \dots$$

Lösung der EW-Gl. von \hat{H} durch den **Separationsansatz**:

$$u(x_1, x_2, \dots, x_d) \sim u_1(x_1)u_2(x_2) \dots u_d(x_d),$$

EnergieEigenwerte:

$$E_{\mathbf{n}} = \sum_{i=1}^d E_i = \hbar\omega \left(\sum_{i=1}^d n_i + \frac{d}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$$

Für $d = 3$:

- ▶ Grundzustand: $\mathbf{n} = (0, 0, 0)$ (keine Entartung)
- ▶ 1. angeregter Zustand: $\mathbf{n} = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$ (3-fach entartet)
- ▶ n. angeregter Zustand: ...

Parität (1D)

Paritätsoperator $\hat{\Pi}$

Wirkung auf \hat{x} und \hat{p}

$$\hat{\Pi}^\dagger \hat{x} \hat{\Pi} = -\hat{x}$$

$$\hat{\Pi}^\dagger \hat{p} \hat{\Pi} = -\hat{p}$$

Wirkung auf Zustände

$$\hat{\Pi}\psi(x) = \psi(-x)$$

$$\hat{\Pi}\psi(p) = \psi(-p)$$

- ▶ hermitesch & unitär: $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}^{-1}$
- ▶ mögliche EW: $\lambda = \pm 1$

$$\lambda = +1 : \quad \hat{\Pi}\psi(x) = \psi(x) = \psi(-x) \quad \Rightarrow \quad \psi : \text{gerade Funktion}$$

$$\lambda = -1 : \quad \hat{\Pi}\psi(x) = -\psi(x) = \psi(-x) \quad \Rightarrow \quad \psi : \text{ungerade Funktion}$$

Paritätsinvariante \hat{H}

$$\hat{\Pi}^\dagger \hat{H} \hat{\Pi} = \hat{H} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{\Pi}, \hat{H}] = 0$$

- ▶ EV von \hat{H} können stets so gewählt werden, dass sie eine definierte Parität besitzen
- ▶ Für den *nicht entarteten Fall*: die zugehörige EV hat eine wohlbestimmte Parität
Bsp: Freie Teilchen $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$: EW $p^2/2m$ entartet; EV $e^{\pm ixp/\hbar}$
Linearkombination von EV: $\cos(xp/\hbar)$ gerade, $\sin(xp/\hbar)$ ungerade

Teilchen im 1D Potential: Lösungsansatz der EW-Gleichung

EW-Gl. von $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ in der x -Darstellung

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

Lösungsansätze:

$$E - V < 0: \quad u(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx} \quad \text{mit } q = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}$$

$$E - V > 0: \quad u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}$$

Wenn $V(x) = V(-x)$, suchen wir Lösungen mit Paritäten (gerade oder ungerade Funktionen).

Anschlußbedingungen an einer Sprungstelle a

- ▶ Für ein stückweise konstantes Potential: $u(x)$, $u'(x)$ stetig

$$u(a^-) = u(a^+) \quad \text{und} \quad u'(x)|_{x=a^-} = u'(x)|_{x=a^+}$$

- ▶ Für ein δ -Potential $V_0\delta(a)$: $u(x)$ stetig

$$u(a^-) = u(a^+) \quad \text{und} \quad u'(x)|_{x=a^+} - u'(x)|_{x=a^-} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} u(a)$$

Gebundene Zustände in 1D

Gebundene Zustände: Teilchen im endlichen Raumbereich, beschrieben durch eine EnergieEigenfunktion, die im Unendlichen gegen Null geht

Beispiel: Potentialtopf mit

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a < x < a \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

und $-V_0 < E < 0$. (Lösungen diskutiert...)

Allgemeine Eigenschaften:

- ▶ Das Energiespektrum ist *diskret*
∴ zulässige Eigenfunktionen $u(x)$ müssen den Randbedingungen genügen
 - ▶ Harmonischer Oszillator, Potentialtopf etc.: $u(x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$
 - ▶ Unendlichtiefer Potentialtopf: $u(x)$ verschwindet auf dem Rand
- ▶ Alle Energie-EW sind *nicht entartet*
(Beweis...)
- ▶ Die Eigenfunktion u_n hat n *Nullstellen* (Knotenzahlen)
Insbesondere hat die Grundzustandswellenfunktion u_0 keine Nullstellen.