



Zusammenfassung

In diesem Kapitel werden wir an Beispielen in einer räumlichen Dimension (Potentialtopf, Potentialbarriere, harmonischer Oszillator) den Umgang mit der Schrödinger-Gleichung demonstrieren. Dieses Kapitel gibt Antworten auf folgende Fragen:

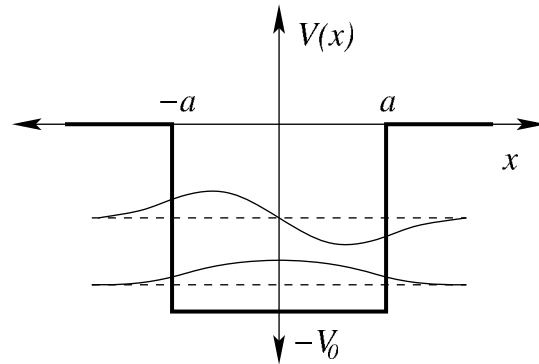
- Welche Eigenschaften muss eine Lösung der Schrödinger-Gleichung haben?
- Wodurch wird das Verhalten der Wellenfunktion von Bindungszuständen bei großen Abständen bestimmt?
- Wodurch kommt die Quantisierung der Energie von Bindungszuständen zustande?
- Was bezeichnet man als Tunneleffekt?
- Welche Lösungsstrategien gibt es für den harmonischen Oszillator?
- Warum muss der Potenzreihenansatz für die Lösung der Schrödinger-Gleichung für Bindungszustände, die auch im Bereich großer Abstände gelten soll, nach Abseparation der asymptotischen Ausdrücke nach endlich vielen Termen abbrechen?
- Was bedeutet die Nullpunktenergie des harmonischen Oszillators?
- Was versteht man unter kohärenten Zuständen?

3.1 Potentialtopf

Das Potential ist in diesem Fall $V(x) = -V_0\theta(|x| < a)$ (Abb. 3.1). Für den Außenbereich ($|x| > a$) lautet demnach die Schrödinger-Gleichung

$$-E_b\psi_A(x) = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_A(x) \iff \psi_A(x) = C_A \exp(-\gamma|x|/\hbar), \quad (3.1)$$

Abb. 3.1 Der endliche Potentialtopf, $V(x) = -V_0$ für $|x| < a$ und 0 sonst, zusammen mit einer Skizze der beiden niedrigsten Wellenfunktionen



wobei $E_b = -E > 0$ ist, da wir gebundene Systeme betrachten wollen (Zustände mit $E > 0$ sind Streuzustände) und

$$\gamma = \sqrt{2ME_b}. \quad (3.2)$$

Die Exponentialfunktion mit positivem Exponenten ist ebenfalls eine Lösung der Gleichung. Diese muss aber verworfen werden, da sie auf nicht normierbare Zustände führt. Für den Innenbereich $|x| < a$ erhalten wir

$$(V_0 - E_b)\psi_I(x) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_I(x), \quad (3.3)$$

wobei $V_0 - E_b > 0$ ist.¹ Die Differentialgleichung im Innenbereich ist also eine Schwingungsgleichung, und wir erhalten

$$\psi_I(x) = C_I^- \sin(px/\hbar) + C_I^+ \cos(px/\hbar) \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{2M(V_0 - E_b)}. \quad (3.4)$$

Die Konstanten C_A , C_I^+ und C_I^- sind nun so zu wählen, dass die Gesamtwellenfunktion

$$\psi(x) = \psi_A^I(x)\theta(-a-x) + \psi_I(x)\theta(a-|x|) + \psi_A^{II}(x)\theta(x-a)$$

an den Grenzen $x = \pm a$ stetig und stetig differenzierbar ist, da sonst die Schrödinger-Gleichung nicht im gesamten Bereich ihre Gültigkeit hätte (Abschnitt 2.1). Aus der Symmetrie des Problems folgt, dass $\psi(x)$ entweder eine gerade Funktion ($\psi(-x) = \psi(x)$) oder eine ungerade Funktion ($\psi(-x) = -\psi(x)$) ist – dementsprechend ist für jeden geraden (ungeraden) Zustand $C_A^I = C_A^{II}$ ($C_A^I = -C_A^{II}$). Das Verhalten einer Wellenfunktion unter Ortsspiegelung bezeichnet man als **Parität**. Aus den Betrachtungen in Abschnitt 2.1 folgt, dass der Grundzustand keinen Knoten hat. Also muss für diesen $C_I^- = 0$ sein und $p < \pi\hbar/(2a)$. Der erste angeregte Zustand hat dann $C_I^+ = 0$ und $p < \pi\hbar/a$ und so weiter. Die beiden niedrigsten Zustände sind in Abb. 3.1 skizziert. Es stehen also für jeden gegebenen Zustand

¹Es ist leicht zu sehen, dass es in dem Bereich $V_0 - E_b < 0$ keine Lösung der Differentialgleichung gibt, die die unten formulierten Anschlussbedingungen erfüllt.



Dreidimensionale Probleme

4

Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird an Beispielen in drei Raumdimensionen (tiefer sphärischer Topf, Wasserstoffatom, harmonischer Oszillator) der Umgang mit der Schrödinger-Gleichung demonstriert. Dieses Kapitel gibt Antworten auf folgende Fragen:

- Wie ist die Parität definiert?
- Welcher Operator erfasst die Winkelabhängigkeit der kinetischen Energie bei dreidimensionalen Problemen, und wie heißen die zugehörigen Eigenfunktionen und Eigenwerte?
- Wie lauten die Kommutatorrelationen der Komponenten des Drehimpulsvektors untereinander und mit \hat{L}^2 ?
- Was ist die Bedeutung der zweiten Quantenzahl der Kugelflächenfunktionen?
- Aus der Kommutatorrelation der Drehimpulse folgt, dass diese entweder halbzahlig oder ganzzahlig sein dürfen. Gilt das auch für den Bahndrehimpuls?
- Für $l > 0$ gilt, dass die Länge des Drehimpulsvektors immer größer ist als seine Projektion auf die z -Achse. Warum muss das so sein?
- Hängt der Hamilton-Operator eines Zweiteilchensystems lediglich von Relativkoordinaten ab, dann lässt er sich als Summe zweier effektiver Einteilchen-Hamilton-Operatoren schreiben – einen für die Relativbewegung und einen für die Schwerpunktbewegung. Welche Massen tauchen in diesen effektiven Operatoren auf?
- In welchen Schritten ist die radiale Differentialgleichung für gebundene Systeme zu lösen?
- Woher kommt die Quantisierung von Bindungsenergien?
- Was kann man aus dem Entartungsmuster des Energiespektrums eines Systems ablesen?

Bevor wir uns der Lösung der Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen zuwenden, werden wir noch einige einführende Überlegungen anstellen, die sich im Folgenden als nützlich erweisen werden.

4.1 Anmerkungen zur Parität

Unter der Paritätstransformation versteht man eine Spiegelung um den Ursprung, also den Übergang

$$\hat{P}(\mathbf{x}) = -\mathbf{x} \iff (r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi),$$

wobei auf der rechten Seite der Übergang für **Kugelkoordinaten**, für die

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi), \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi) \quad \text{und} \quad z = r \cos(\theta)$$

ist, ausformuliert wurde. Wenn sich das Potential unter einer Paritätstransformation nicht ändert, so kann man die Energie-Eigenzustände so wählen, dass sie eine wohldefinierte Parität haben, wie wir es schon in den eindimensionalen Beispielen gesehen haben. Im Folgenden wird die Parität der Zustände eine wichtige Rolle spielen bei der Diskussion der Entartungsgrade spezieller Potentiale, bei den Symmetrien, bei Mehrteilchensystemen und bei den Auswahlregeln in der Störungstheorie.

Offensichtlich entspricht die zweifache Anwendung von \hat{P} der Identität. Daher sind die Eigenwerte von \hat{P} lediglich ± 1 . Ein Zustand ψ_2 gehe durch Anwendung des Operators \hat{Q} aus dem Zustand ψ_1 hervor,

$$\psi_2(\mathbf{x}) = N \hat{Q} \psi_1(\mathbf{x}), \quad (4.1)$$

wobei N eine evtl. notwendige Normierungskonstante bezeichne, und es gelte

$$\hat{P} \psi_i(\mathbf{x}) := \psi_i(-\mathbf{x}) = \pi_i \psi_i(\mathbf{x}),$$

wobei π_i die Parität des Zustands ψ_i benennt. Außerdem gelte für den in Gl. (4.1) gegebenen Operator \hat{Q} , dass $\hat{P} \hat{Q} = \pi_{\hat{Q}} \hat{Q} \hat{P}$ ist (danach ist also $\pi_{\hat{x}} = \pi_{\hat{p}} = -1$, aber $\pi_{\hat{x} \cdot \hat{p}} = +1$). Damit finden wir

$$\pi_2 = \pi_{\hat{Q}} \pi_1. \quad (4.2)$$

4.2 Der quantenmechanische Bahndrehimpuls

Der quantenmechanische Bahndrehimpuls ist analog zum klassischen definiert:

$$\hat{L}_i = (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}})_i = \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{ikl} \hat{x}_k \hat{p}_l \quad (4.3)$$

Zusammenfassung

In diesem Kapitel werden die allgemeinen Überlegungen aus Kap. 2 durch formale Betrachtungen ergänzt, und mit der Bra-Ket-Notation wird ein wichtiges Werkzeug eingeführt. Insbesondere werden der Vektorraum der Wellenfunktionen, der Hilbertraum, und das zugehörige Skalarprodukt eingeführt. Ergänzt werden die Ausführungen durch eine kurze Diskussion der Zustände im Kontinuum. Dieses Kapitel gibt die Antworten auf folgende Fragen:

- Was ist der Hilbertraum, \mathcal{H} ? Welche Dimension hat er im Allgemeinen?
- Wie ist ein Skalarprodukt auf dem Hilbertraum zu definieren, und wann bezeichnet man zwei Wellenfunktionen als orthonormal?
- Was muss das Funktionensystem $u_k, k = 1, \dots, N_{\max}$ erfüllen, damit es eine Basis von \mathcal{H} bildet?
- Was versteht man unter einem Bra- und was unter einem Ket-Vektor?
- Was versteht man unter einer Vollständigkeitsrelation?
- Wie bekommt man die Matrixdarstellung eines Operators?

5.1 Der Hilbertraum

Physikalische Systeme werden durch quadratintegrale Wellenfunktionen, die die Schrödingergleichung lösen, beschrieben. In diesem Kapitel werden wir nun einige Formalia zu diesen Wellenfunktionen und den Raum, den sie aufspannen, besprechen. Wie in den anderen Kapiteln werden vor allem die wichtigen Schlüsselbegriffe eingeführt und die Werkzeuge für die weiteren Betrachtungen bereitgestellt ohne auf mathematische Exaktheit zu achten. Insbesondere wird implizit angenommen, dass die betrachteten Funktionen hinreichend glatt sind. Eine recht detaillierte Einführung in die Thematik findet sich z. B. in [5].

Da die Schrödinger-Gleichung linear in ψ ist, ist die Summe aus zwei Lösungen auch wieder eine Lösung. Des Weiteren erfüllt diese *Addition* die Vektorraumaxiome Assoziativität, Existenz eines Nullelements und von Inversen sowie das Distributivgesetz. Also spannen die physikalischen Wellenfunktionen einen komplexen Vektorraum auf:

Hilbertraum \mathcal{H}

$$\mathcal{H} = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2 < \infty \right\} \quad (5.1)$$

Dabei sind Nullfunktionen, also Funktionen mit $\int d^3x |f(\mathbf{x})|^2 = 0$, obwohl $f \neq 0$ ist, explizit ausgenommen, so dass $\int d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2 = 0$ genau dann gilt, wenn $\psi(\mathbf{x}) \equiv 0$ ist. Der Hilbertraum ist vollständig: Jede **Cauchy-Folge**¹ von Elementen in \mathcal{H} führt auf Elemente in \mathcal{H} .

Die Definition des Hilbertraumes enthält die Norm, die bereits in Gl. (1.3) eingeführt wurde. Sie leitet sich aus dem Skalarprodukt

$$(\psi_1 | \psi_2) = \int d^3x \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) \quad (5.2)$$

ab. Gemäß Definition gilt

$$(\lambda_1 \psi_1 | \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1^* \lambda_2 (\psi_1 | \psi_2), \quad (5.3)$$

wobei die λ_i komplexe Konstanten bezeichnen. Wir bezeichnen zwei Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 als **orthogonal** zueinander, wenn

$$(\psi_1 | \psi_2) = 0$$

gilt. Dementsprechend bildet die Menge von Vektoren u_i im Hilbertraum \mathcal{H} ein Orthonormalsystem, wenn

$$(u_i | u_j) = \delta_{ij}$$

ist. Die u_i bilden eine Basis von \mathcal{H} , wenn es für alle ψ aus \mathcal{H} einen Satz von komplexen Koeffizienten c_i gibt, so dass

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{N_{\max}} c_i u_i(\mathbf{x}) \implies c_k = (u_k | \psi) \quad (5.4)$$