

Schrödingergleichung eines Punktteilchens (in 1D)

zuerst für freies Teilchen der Masse m :

→ 1) Erhaltung von Energie und Impuls

2) Energie-Impuls-Beziehung $E = p^2 / 2m$

beide Bedingungen erfüllt wenn

$$\hat{H} \stackrel{!}{=} \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$\left[\begin{array}{l} \rightarrow [\hat{H}, \hat{H}] = 0, [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \end{array} \right. \rightarrow 1)$$

$$\rightarrow \langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle_{|\psi\rangle} \rightarrow 2)$$

→ Zustand $|\psi(t)\rangle$ eines freien Teilchens genügt

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2m} |\psi(t)\rangle$$

d.h. zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(x,t) = \langle \varphi_x | \psi(t) \rangle$ des Teilchens genügt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t)$$

allgemeiner Fall: Teilchen unterliegt Wirkung eines Potentials mit Potentialfunktion $\mu: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$
 $x \mapsto \mu(x)$

→ Potentialoperator $\hat{V} = \mu(\hat{x})$; d.h. genau $\hat{V}|\varphi_{x_0}\rangle = \mu(x_0)|\varphi_{x_0}\rangle$

→ Wirkung von V auf Wellenfunktion:

$$\boxed{\psi(x) \xrightarrow{\hat{V}} \mu(x) \psi(x)}$$

→ allg. Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

→ Schrödinger Gleichung eines Teilchen

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) |\psi(t)\rangle$$

in Ortsdarstellung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi(x, t)$$

(E. Schrödinger 1926)

lineare partielle DGL

1. Ordnung in t ,

2. Ordnung in x

Standardlösmethode:

bestimme Energieeigenzustände $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots$ und
Eigenenergien $E_0, E_1, \dots$ anhand

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad ;$$

in Ortsdarstellung: bestimme Energieeigenfunktionen
 $\psi_0(x), \psi_1(x), \dots$ und Eigenenergien $E_0, E_1, \dots$
anhand

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + u(x) \right) \psi_n(x) = E_n \psi(x)$$



zeit unabhängige Schrödingergleichung

Bedingung an Energieeigenfunktionen

$$|\psi_n(x)| < \infty \quad \text{für} \quad |x| \rightarrow \infty$$

("Normierbarkeit")

mit $|\psi_n\rangle$, E_n weitere Vorgehensweise wie zuvor:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \xrightarrow{t} |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle$$

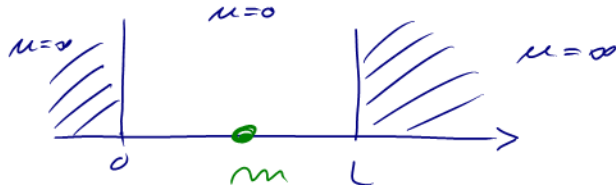
d.h.:

$$\psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x) \xrightarrow{t} \psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(x)$$

Eindimensionale Modellsysteme

- 1) Teilchen im Kasten
- 2) Teilchenstreuung an Potentialstufe, -schwelle, -barriere
→ Tunneleffekt
- 3) 1D harmonischer Oszillator

Teilchen im Kasten:



$$u(x) = \begin{cases} \infty & x \notin [0, L] \\ 0 & x \in [0, L] \end{cases}$$

→ stetige Energieeigenfunktion $\psi_E(x)$ verschwindet für $x \leq 0$ und $x \geq L$, und ist Lösung der freien S.-Gl. für $x \in [0, L]$

→

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

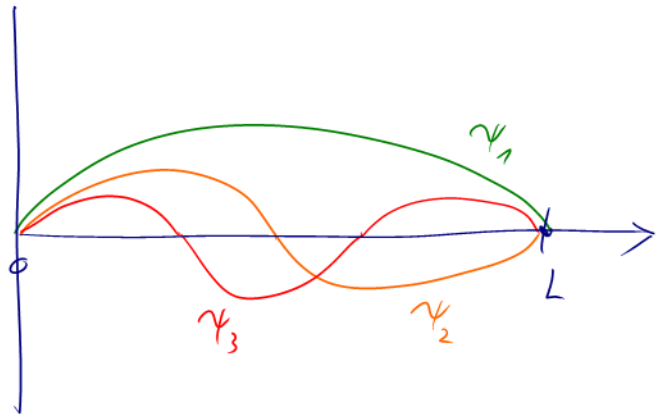
, wobei $k_n = \frac{\pi}{L} n$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad \text{wobei } k_n = \frac{\pi}{L} n$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



Beachte: Beschränkung des Teilchens auf endliches Intervall $[0, L]$ führt zu gequantelten Eigenenergien

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$