Ferienkurs Quantenmechanik
Sommersemester 2014

Fabian Jerzembeck und Christian Kathan
Fakultät für Physik
Technische Universität München

9. September 2014

Schrödingergleichung und Potentialprobleme

Die Quantenmechanik unterscheidet sich teilweise dramatisch von der klassischen Physik. Daher wollen wir zunächst einmal ein Blick auf die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustandes werfen, bevor wir uns dann näher mit der sogenannten Dichtematrix beschäftigen. Anschließend betrachen wir einfache Potentialprobleme und der quantenmechanischen harmonischen Oszillator, die Standardbeispiele innerhalb der Quantenmechanik sind und mit denen sich einfach Fragen schon Beantworten lassen können.

Dieser Ferienkurs kann weder eine komplette Vorlesung behandeln noch ein Buch ersetzen. Es wird versucht einem einführenden Überblick in die Vorlesung zur Quantenmechanik von Prof. Zwerger im SS2014 zu geben. Der Ferienkurs orientiert sich dabei, sowohl an die Vorlesung vom Herrn Zwerger, wie auch zu Teilen an den Ferienkurs QM 2013, die Vorlesung von Prof. Ratz im SS2010 und den Büchern zum Grundkurs Theoretisch Physik 5/1 und 5/2 von Herrn W. Nolting im Springer Verlag.

1 Zeitentwicklung und Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung wie sie z.B. in der klassischen Physik durch eine Trajektorie beschrieben werden kann, ist in der Quantenmechanik nicht mehr möglich. Die zeitliche Evolution eines Teilchen wird in der Quantenmechanik dagegen durch die zeitliche Veränderung ihrer Wellenfunktion und damit der Wahrscheinlichkeitsdichte beschrieben. Je nach dem in welchem quantenmechanischen Bild man sich befindet, kann dies z.B. durch die Schrödinger- oder auch die Heisenberg-Gleichung beschrieben werden.

1.1 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Gestern haben wir schon gesehen, dass ein quantenmechanisches Teilchen durch eine Wellenfunktion $\Psi(\vec{r},t) = \psi(r)\chi(t)$, die vom Ort und der Zeit abhängt, beschrieben werden kann. Betrachtet man z.B. ein zeitunabhängiges Potential $V(r)$, so lässt sich ein Seperationsansatz finden, der zu einer ebenfalls zeitunabhängigen Wellenfunktion führt, bei der die Zeitabhängigkeit $\chi(t)$ 'abgespalten' wird. Damit erhält man die stationäre Schrödinger-Gleichung, die wir schon kennen gelernt haben.

$$\hat{H}\psi(r) = \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r)\Big]\psi(r) = E_n\psi(r)$$

Bei diesen zeitunabhängigen Problemen ist E_n der Energie-Eigenwert zur Eigenfunktion $\psi(r)$ des Hamiton-Operators $\hat{H}$ und χ ergibt sich zu:

$$\chi(t) = \exp\left(-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right)$$

Jetzt wollen wir jedoch explizit die Zeitabhängigkeit der Schrödinger-Gleichung betrachten.

Satz 1 *Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$\hat{H}\Psi(r,t) = \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r)\Big]\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t)$$

Allgemein lässt sich die zeitliche Entwicklung eines Zustandes jedoch über einen unitären Zeitentwicklungsoperator beschreiben

Satz 2 *Der Zeitentwicklungsoperator*

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)$$

mit dem die Zeitentwicklung eines Zustandes die folgende Form annimmt

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

1.2 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

Wir wollen nun einen Blick auf zwei verschiedene quantenmechanische Bilder werfen. Je nach Problem, welches man betrachtet, kann es vorteilhaft sein, die Fragestellung in dem einen oder dem anderen Bild zu beschreiben.

Das Schrödinger-Bild geht von zeitabhängigen Zuständen $|\psi(t)\rangle$ aus und Operatoren, die jedoch nur explizit von der Zeit abhängen können $\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$. Die Dynamik des Systems wird dann durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung und dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ beschrieben.

* Zustände sind allgemein zeitabhängig: $|\psi(t)\rangle$
* Operatoren können nur explizit von der Zeit abhängen $\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$
* Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben

Im Heisenberg-Bild hingegen nimmt man zeitunabhängige Zustände $|\psi_H\rangle$ und zeitabhängige Operatoren $\hat{A}_H(t)$ an.

* Zustände sind nicht zeitabhängig: $|\psi_H\rangle$
* Operatoren sind Zeitabhängen $\hat{A}_H = \hat{A}_H(t)$
* Die Zeitentwicklung wird durch Heisenbergr-Gleichung beschrieben

Satz 3 *Die Heisenberg-Gleichung*

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}_H\right] + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$$

Dabei lässt sich ein Operator aus dem Schrödinger-Bild $\hat{A}$ in einen Operator im Heisenberg-Bild $\hat{A}_H$ mittels einer unitären Transformation umwandeln

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}_t^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}_t$$

1.3 Kontinuität in der Quantenmechanik

Mit der Einführung der Schrödinger-Gleichung und der Forderung nach der Normierbarkeit haben wir gesehen, dass das räumliche Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit angibt ein Teilchen in einem bestimmten Volumen zu finden.

Aus einer Differentation dieser Wahrscheinlichkeitsdichte und unter Verwendung der Schrödinger-Gleichung erhält man die sog. Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}(\vec{r}, t)$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*\right)$$

mit der sich in Analogie zur Elektrodynamik eine Kontinuitätsgleichung formulieren lässt

Satz 4 *Die Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt dabei, dass sich eine Wahrscheinlichkeit nicht 'zerstören' lässt, sondern das eine Änderung der Wahrscheinlichkeit in einem bestimmten Volumen mit einem 'Wahrscheinlichkeitsfluss' durch die Oberfläche des Volumens verbunden ist.

Eine Konsequenz der Kontinuitätsgleichung ist, dass in einem reellen Potential ein Teilchen nicht verschwinden kann, da wegen der Normierungsbedingung die Wellenfunktion im Unendlichen verschwinden muss, sodass auch die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit verschwindet.

2 Dichtematrix

Es erscheint sicherlich naheliegend, dass nur in den seltensten Fällen ein quantenmechanisches System einem reinen Zustand $|\psi\rangle$ zugeordnet werden kann und man somit auch einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen messen kann. Im Allgemeinen sind die Zustände nicht vollständig präpariert. Das bedeutet, dass verschiedene Zustände $|\psi_\lambda\rangle$ nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit p_λ auftreten, sodass verschiedene λ zu exklusiven Ereignissen führen. Um mit diesem Hindernis umgehen zu können, wird der quantemechanische Dichte-Operator oder Matrix eingeführt

Satz 5 *Die Dichtematrix*

$$\rho = \sum_\lambda p_\lambda |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|$$

Für einen reinen Zustand geht die Dichtematrix über

$$\rho = \sum_\lambda p_\lambda |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda| \longrightarrow \rho = |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|$$

Der Erwartungswert einer beliebigen Observablen A lässt sich allgemein bestimmen durch

$$\langle A\rangle_\rho = \mathrm{Sp}(\rho A)$$

Weiterhin gilt für den Dichteoperator, dass er selbstadjungiert ist und

$$\rho^2 = \begin{cases} = 1 & \text{für einen reinen Zustand} \\ < 1 & \text{für einen gemischten Zustand} \end{cases}$$

3 Eindimensionale Potentialprobleme

Ich diesem Abschnitt wollen wir nun unsere Betrachtung der Quantenmechanik um ein wichtiges Kapitel erweitern. Bisher haben wir ein quantenmechanisches Teilchen mittels der Schrödinger-Gleichung im freien Raum, d.h. ohne die Einflüsse eines äußeren Potentials betrachtet. Dies ist natürlich weder sonderlich interessant, noch wirklich realitätsnah.

Es sei jedoch hier erwähnt, dass es nur eine sehr begrenzte Anzahl von Potentialen gibt mit denen die Schrödinger-Gleichung einfach gelöst werden kann.

3.1 Generelle Betrachtungen

Ausgangspunkt zur Betrachtung von quantenmechanischen Potentialproblemen ist die stationäre Schrödinger-Gleichung. Weitergehend betrachten wir nun zusätzlich ein äußeres Potential $V(\vec{r})$.

Satz 6 *Die stationäre Schrödinger-Gleichung*

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r},t) = E\Psi(\vec{r},t)$$

Damit wir auch sinnvolle Ergebnisse erhalten, müssen wir für diese Eigenwertgleichung fordern, dass für ihre Lösungen gilt

(i) Ψ muss normierbar sein

(ii) Ψ muss auf dem gesamten Raum stetig sein

Zusätzlich zur Stetigkeit fordert man im Allgemeinen auch Differenzierbarkeit, sofern das Potential keine Unstetigkeitsstellen aufweist(z.B. bei einem δ-Potential). Für derartige Probleme kann man, wie wir später sehen werden, entsprechende Sprungbedingungen ableiten.

3.2 Der Potentialtopf

Ein klassisches Beispiel ist der Potentialtopf. Im Allgemeinen kann man zum Lösen eines solchen Potentialproblems sich an ein "Kochrezept"halten, was weitesgehend für alle Probleme dieser Art gilt.

Die einzelnen Schritte sind dabei

(i) Schrödinger-Gleichung aufstellen und in Potentialbereiche unterteilen

(ii) Die Wellengleichung mit dem zugehörigen Wellenvektor für die einzelnen Bereiche bestimmen

(iii) Anschlussbedingungen zwischen den einzelnen Bereichen formulieren

(iv) Gegebenenfalls Berechnung der Zustandsenergien oder der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Dabei sind der Transmissions- T und der Reflexionskoeffizient R gegeben durch

$$T = \left|\frac{j_{Trans}}{j_{Ein}}\right| = \frac{|\Psi_{Trans}|}{|\Psi_{Ein}|} \qquad R = \left|\frac{j_{Ref}}{j_{Ein}}\right| = \frac{|\Psi_{Ref}|}{|\Psi_{Ein}|}$$

Beispiel: Potentialtopf

3.3 δ-Potential

Im vorigen Abschnitt haben wir ein endliches Potentialproblem betrachtet. Nun kommen wir zu einem 'unendlichen' $\delta(x)$-Potential. Auch hier können sowohl gebundene, wie auch Streuprobleme betrachtet werden. Der große Unterschied ist aber, dass zwar die Wellenfunktion $\psi(x)$ weiterhin überall stetig sein muss, dies aber nicht mehr für ihre Ableitung $\psi'(a)$ am Ort der Unstetigkeit gilt. Um dieses Problem zu lösen, integriert man über die Schrödinger-Gleichung und somit über die Singularität und lässt die Integrationsgrenzen gegen Null gehen. Dabei erhalten wir den folgenden Ausdruck

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+}\left[\Psi'(\varepsilon)-\Psi'(-\varepsilon)\right]-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi(0)+\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\Psi(x)dx}_{=0}=0$$

Beispiel: Repulsives δ-Potential

3.4 Eindimensionaler harmonischer Oszillator

Wie kaum ein anderes Konzept, hat der harmonische Oszillator eine überragende Bedeutung für die Physik. Daher verwundet es nicht, dass die Fragestellung nach den Eigenzuständen und Eigenenergien des quantenmechanischen harmonischen Oszillators eine der zentralen Themen einer Einführungsvorlesung ist. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H(p,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

wobei ω die Oszillatorfrequenz darstellt. Mit diesem Hamilton-Operator hat die stationäre Schrödinger-Gleichung gerade die Gestalt

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2\right]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beinhalten die sog. Hermiten-Polynome $H_n(x)$.

Satz 7 *Die Hermiten-Polynome lauten*

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}(2^n n!)^{-1/2}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right); \quad n = 0,1,2,...$$
$$H_n(x) = \exp\left(\frac{x^2}{2}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

Wie auch beim Potentialtopf haben wir hier einen Satz von gebundenen Zuständen mit diskreten Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Da n eine natürliche Zahl ist, sehen wir direkt, dass der harmonische Oszillator eine von Null verschiedene Grundzustandsenergie besitzt und äquidistante Energieeigenzustände hat.

Beispiel: Der harmonische Oszillator

Algebraische Methode

Neben dieser analytischen Methode gibt es allerdings noch eine andere, durchaus elegante Methode um das Problem des harmonischen Oszillators zu lösen. Diese Methode soll im Folgenden genauer dargestellt werden.

Bei der algebraischen Methode definiert man sich zwei neue Operatoren a und $a^\dagger$. Diese beiden Operatoren sind zwar nicht hermitesch, aber zueinander adjungiert. Sie werden wie folgt definiert

Satz 8 *Der Erzeugungs- und Vernichtungsoperator*

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right) \qquad \textit{und} \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)$$

Zu beachten ist, dass sowohl x als auch p in diesem Fall ebenfalls als Operatoren angesehen werden sollten. Die Definition dieser beiden Operatoren scheint zunächst vom Himmel gefallen zu sein. Eine Legitimation erfährt sie jedoch, wenn man sich das Produkt $a^\dagger a$ der beiden Operatoren ansieht. Die Operatoren dürfen dabei allerdings nicht ohne Weiteres kommutiert werden. Man muss für die erforderlichen Umformungen die Kommutatorrelation $[x, p] = i\hbar$ anwenden.

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

Wir haben damit eine Möglichkeit gefunden, den Hamiltonoperator dieses Systems durch die beiden neu definierten Operatoren auszudrücken

Gleichzeitig ist die Kommutatorrelation der beiden Operatoren $[a, a^\dagger] = 1$. Um nun den quantenmechanischen harmonischen Oszillator zu lösen, muss lediglich der Eigenwert des *Besetzungszahloperators* $n = a^\dagger a$ gefunden werden.

$$H\Psi = E\Psi \qquad \Rightarrow \qquad \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\Psi = E\Psi \qquad \Rightarrow \qquad n\Psi = \nu\Psi$$

Die Operatoren a und $a^\dagger$ haben aber noch weitere nützliche Eigenschaften. So wird der Operator $a^\dagger$ auch als *Aufsteige- oder Erzeugungsoperator* bezeichnet, während man den Operator a auch *Absteige- oder Vernichtungsoperator* nennt. Diese Bezeichnung geht auf bestimmte Eigenschaften dieser Operatoren zurück, nach denen gilt:

Wenn Ψ Eigenfunktion von n zum Eigenwert ν ist,

$$n|\Psi_\nu\rangle = \nu|\Psi_\nu\rangle$$

dann ist $a^\dagger \Psi_\nu$ Eigenfunktion von n mit Eigenwert $\nu + 1$ und $a\Psi_\nu$ Eigenfunktion zum Eigenwert $\nu - 1$

$$a^\dagger |\Psi_\nu\rangle = (\nu + 1)|\Psi_\nu\rangle \qquad \text{und} \qquad a|\Psi_\nu\rangle = (\nu - 1)|\Psi_\nu\rangle$$

Bekannt ist, dass Zustände negativer Energie für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator nicht existieren können. Demnach kann man formulieren, dass es einen Zustand minimaler Energie geben muss, den Grundzustand Ψ_0. Eine weitere Erniedrigung des Grundzustandes durch den Absteigeoperator führt auf die Null.

$$a|\Psi_0\rangle = 0$$

Schreibt man nun den Absteigeoperator nach seiner Definition aus, erhält man eine Differentialgleichung für den Grundzustand, die recht leicht durch beispielsweise Separation der Variablen gelöst werden kann.

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right]\Psi_0(x) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \Psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Durch n-maliges Anwenden des Aufsteigeoperators kann man nun die Eigenfunktionen $\Psi_n(x)$ generieren. Man findet

$$\Psi_n(x) = A_n \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right]^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

in Übereinstimmung mit dem analytischen Resultat, was man durch einigen Rechenaufwand nachweisen kann. Darüber hinaus können wir die Eigenwerte des harmonischen Oszillators bestimmen.

Wendet man den Teilchenzahloperator n auf den Grundzustand an, so wird der Grundzustand wegen des Absteigeroperators vernichtet. Demzufolge gilt

$$n|\Psi_0\rangle = a^\dagger a|\Psi_0\rangle = 0$$

so dass der Eigenwert des Teilchenzahloperators angewendet auf den Grundzustand identisch Null ist. Damit sehen wir, dass der Eigenwert des Hamiltonoperators zum Grundzustand $\hbar\omega/2$ ist. Für den n-ten Energieeigenwert E_n können wir daher folgern

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$