

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t(x) = \hat{H} \Psi_t(x). \quad (20)$$

Auf Abb. 10 findet man ein repräsentatives Beispiel für eine solche Zeitevolution.

**Verallgemeinerung auf drei Raumdimensionen.** Der zum Ortsvektor  $\mathbf{r}$  gehörige Operator lautet  $\hat{\mathbf{r}} := (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ ; der zum Impulsvektor  $\mathbf{p}$  gehörige Operator lautet  $\hat{\mathbf{p}} := (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \frac{\hbar}{i} (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ . Der der Größe  $|\mathbf{p}|^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$  entsprechende Operator ist somit gegeben durch

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) =: -\hbar^2 \Delta;$$

hierbei ist  $\Delta$  eine Abkürzung für den Ausdruck  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , den sogenannten **Laplace-Operator**. Der Hamiltonoperator lautet also

$$\hat{H} := \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}). \quad (21)$$

In Abb. 12 auf der nächsten Seite ist die Zeitevolution eines zweidimensionalen Wellenpakets skizziert, das auf einen Doppelspalt (vgl. Abb. 1) trifft. Zur graphischen Darstellung wurde die in Abb. 11 dargestellte Farbskala verwendet, bei welcher die Helligkeit dem Betrag  $|\Psi(x)|$  der Wellenfunktion entspricht und der Farbton deren komplexer Phase.

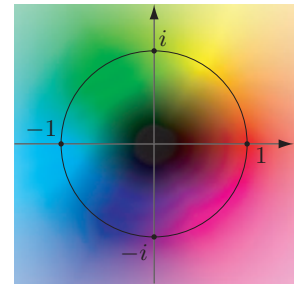


Abbildung 11: Graphische Darstellung einer komplexwertigen Wellenfunktion mit Hilfe einer Farbskala der Betrags *und* der komplexen Phase

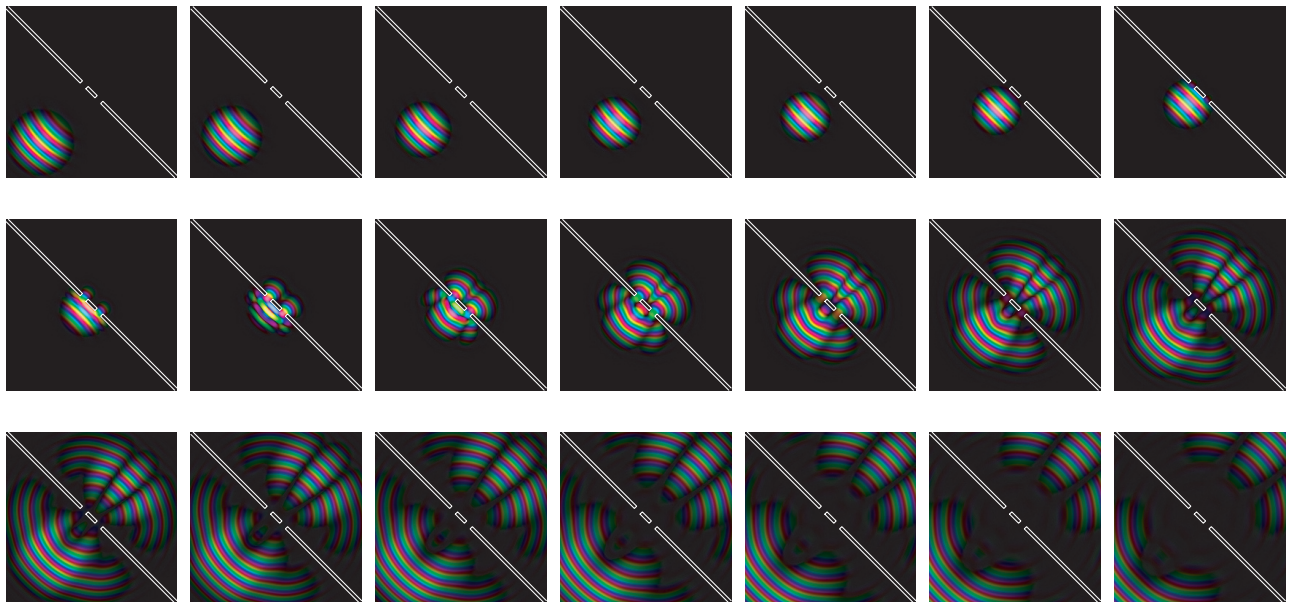


Abbildung 12: Zeitevolution von  $\Psi_t(x)$  beim Doppelspaltexperiment von Abb. 1. Die potentielle Energie  $V(x, y)$  ist überall gleich Null, außer innerhalb der weiß umrandeten Wand, wo sie unendlich groß ist. Auf Abb. 11 findet man die verwendete Farbskala. (Nach Thaller, vgl. Fußnote 2.)

**EIGENFUNKTIONEN DES HAMILTONOPERATORS**

Wie ändert sich die Wellenfunktion  $\Psi_t(x)$  im Laufe der Zeit, wenn ein Teilchen zum Zeitpunkt  $t = 0$  in einem Eigenzustand der Energie ist, d. h. wenn  $\hat{H}\Psi_0(x) = E\Psi_0(x)$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  gilt? Die Antwort lautet

$$\Psi_t(x) := \Psi_0(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (22)$$

denn dieses  $\Psi_t(x)$  ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (20):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t(x) &= i\hbar \Psi_0(x) \left( -\frac{iE}{\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} = E\Psi_0(x) e^{-iEt/\hbar} \\ &= \hat{H}\Psi_0(x) e^{-iEt/\hbar} = \hat{H}\Psi_t(x). \end{aligned}$$

Somit wird die Wellenfunktion von Energie-Eigenzuständen im Laufe der Zeit lediglich mit einem periodisch oszillierenden Faktor  $e^{-iEt/\hbar}$  multipliziert, d. h. der physikalisch meßbare Zustand ändert sich nicht, denn wir haben auf Seite 3 gesehen, daß Wellenfunktionen, die sich nur um einen Multiplikationsfaktor mit Absolutquadrat eins unterscheiden, physikalisch ununterscheidbar sind. Daher nennt man Energie-Eigenzustände auch **stationäre Zustände**. In der Tat ist, wenn  $\Psi_0(t)$  ein Energie-Eigenzustand ist, auch  $\Psi_t(x)$  mit  $t > 0$  ein Energie-Eigenzustand, denn

$$\hat{H}\Psi_t(x) = e^{-iEt/\hbar} \hat{H}\Psi_0(x) = E e^{-iEt/\hbar} \Psi_0(x) = E\Psi_t(x).$$

Außerdem ist die Zeitevolution von Energie-Eigenzuständen derart, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $|\Psi_t(x)|^2$  zeitunabhängig ist, denn es gilt

$$|\Psi_t(x)|^2 = \left( e^{-iEt/\hbar} \Psi_0(x) \right)^* e^{-iEt/\hbar} \Psi_0(x) = |\Psi_0(x)|^2.$$

Für die von uns verwendete graphische Darstellungsweise der Wellenfunktionen bedeutet dies, daß sich bei der Zeitevolution von Energie-Eigenzuständen nur die *Farben* ändern, nicht aber die *Form* der  $|\Psi_t(x)|$ -Kurve.

Da wir in der Spektroskopie sehr viel mit Energie-Eigenzuständen zu tun haben, benutzen wir ab jetzt immer die Abkürzung  $\psi(x) := \Psi_0(x)$ . Energie-Eigenzustände mit Energie-Eigenwert  $E$  haben somit die Form

$$\Psi_t(x) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad \text{mit} \quad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x); \quad (23)$$

die Gleichung  $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$  nennt man **zeitunabhängige Schrödingergleichung**.

### 3 Freie Teilchen – Teilchen im Kasten

#### FREIE TEILCHEN

Für ein sich frei bewegendes Teilchen gilt  $V(x) \equiv 0$  und somit  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ . Daraus folgt, daß Eigenfunktionen des Impulses  $\psi(x) = e^{ikx}$  mit  $k = p/\hbar$  auch Eigenfunktionen der Energie sind, und zwar gilt

$$\hat{H} e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ikx} = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_E e^{ikx};$$

der Energie-Eigenwert

$$E := \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (24)$$

entspricht in diesem Fall der kinetischen Energie. Wichtig ist die Feststellung, daß  $k$ , und somit auch die Energie  $E$ , beliebige Werte annehmen können. Man spricht von einem **kontinuierlichen Energiespektrum**.

Sind nun *alle* Energie-Eigenfunktionen von der Form  $x \mapsto e^{ikx}$ ? Die Antwort lautet nein. Planwellen mit betragsgleichem Impuls in entgegengesetzte Richtungen (d. h. einmal mit  $k$  und einmal mit  $-k$ ) haben nämlich dieselbe Energie  $E = \hbar^2 k^2/2m$ , denn es gilt

$$\hat{H} e^{-ikx} = \frac{\hbar^2 (-k)^2}{2m} e^{-ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{-ikx}.$$

Somit ist jede *Superposition* von  $e^{ikx}$  und  $e^{-ikx}$ , also

$$\psi(x) := a_+ e^{ikx} + a_- e^{-ikx}, \quad (25)$$

wobei  $a_+$  und  $a_-$  komplexe Zahlen sind, auch eine Eigenfunktion der Energie mit Eigenwert  $E = \hbar^2 k^2/2m$ , wie man leicht zeigen kann. Solche Superpositionen sind im allgemeinen (d. h. für  $k \neq 0$ ,  $a_+ \neq 0$  und  $a_- \neq 0$ ) keine Eigenfunktionen des Impulses mehr. Man kann zeigen, daß man *jede* Energie-Eigenfunktion in der Form (25) schreiben kann.

Mit Hilfe von  $e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx$  kann man den Ausdruck (25) folgendermaßen umschreiben:

$$\psi(x) = \underbrace{(a_+ + a_-)}_{=: a} \cos kx + i \underbrace{(a_+ - a_-)}_{=: b} \sin kx. \quad (26)$$

Für  $b = 0$  (d. h.  $a_+ = a_-$ ) z. B. erhält man für  $\psi(x)$  eine Cosinus-Funktion (vgl. Abb. 13).

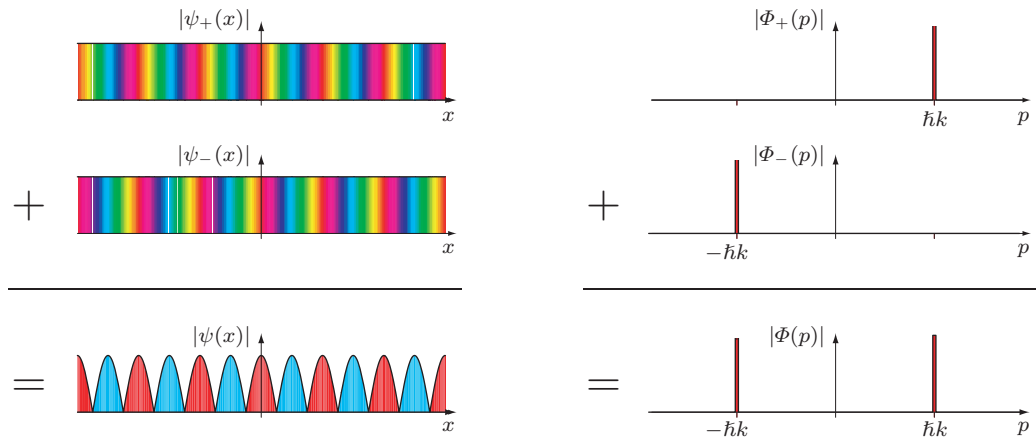


Abbildung 13: Superposition  $\psi(x) := a_+ \psi_+(x) + a_- \psi_-(x)$  zweier Planwellen  $\psi_+(x) := e^{ikx}$  und  $\psi_-(x) := e^{-ikx}$ , hier mit  $a_+ = a_- = \frac{1}{2}$  (links). Auf der rechten Seite sind die entsprechenden „Impulsfunktionen“ dargestellt.

### TEILCHEN IN EINEM KASTEN

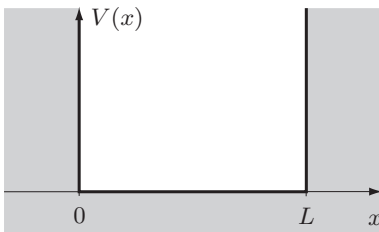


Abbildung 14: Potentielle Energie des Teilchens im Kasten

Wir nehmen nun an, das Teilchen befindet sich in einem eindimensionalen Kasten mit undurchdringbaren Wänden am Ort  $x = 0$  und  $x = L$ . Außerhalb des Kastens soll die potentielle Energie unendlich sein, innerhalb gleich Null (Abb. 14):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Außerhalb des Kastens kann sich das Teilchen nicht aufhalten; somit gilt  $\psi(x) = 0$  für  $x \leq 0$  und  $x \geq L$ . Innerhalb des Kastens, d. h. für  $0 < x < L$ , ist das Teilchen „frei“ und wir können die Wellenfunktion gemäß (26) ansetzen.

Aus  $\psi(0) = 0$  und  $\cos 0 = 1$  folgt  $b = 0$  und damit  $\psi(x) = a \sin kx$ . Aus  $\psi(L) = 0$  und  $\sin n\pi = 0$  (mit  $n = 0, 1, 2, \dots$ ) ergibt sich, daß  $k$  nur die Werte  $n\pi/L$  annehmen kann. Die Energieeigenfunktionen sind also gegeben durch

$$\psi_n(x) = a \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

(Für  $n = 0$  gilt  $\psi(x) = \psi_0(x) \equiv 0$ , so daß man diesen Fall als unphysikalisch eliminieren muß.) Der Faktor  $a$  ergibt sich aus der Normierungsbedingung (2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |a|^2 \int_{-L}^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \dots = \frac{1}{2} |a|^2 L.$$