
Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 6
Wellenfunktion und Schrödingergleichung

Wintersemester 15/16

Im vierten Postulat der Quantenmechanik geht es um die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion:

Die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, ein Teilchen am Ort $\mathbf{r}$ zu finden, ist $|\Psi(\mathbf{r})|^2 = \Psi(\mathbf{r})^* \Psi(\mathbf{r})$.

Diese Aussage gilt für eine bereits normierte Wellenfunktion.

1 Bedingungen an eine Wellenfunktion

- (i) Ist die Wellenfunktion eine observable (physikalisch messbare) Größe?
Wie ist die Wahrscheinlichkeitsdichte definiert und wie erhält man daraus die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron in einem bestimmten Raumbereich zu finden?
Warum muss die Wellenfunktion quadratintegrabel sein?

- (ii) Welche der folgenden Funktionen sind quadratintegrabel im Intervall $(-\infty; +\infty)$?

1. $\Psi(x) = \sin x$ 2. $\Psi(x) = e^{-x^2}$ 3. $\Psi(x) = x \cdot e^{-ix^2}$ 4. $\Psi(x) = x \cdot e^{-x^2}$

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \cdot e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

- (iii) Nennen Sie zwei weitere Bedingungen, die eine Wellenfunktion erfüllen muss.

Das fünfte Postulat der Quantenmechanik geht der Frage nach, wie man die Wellenfunktion physikalisch erhält und wie sie sich zeitlich entwickelt:

Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion wird durch die (zeit- abhängige) Schrödingergleichung beschrieben.

Die zeitabhängige Schrödingergleichung ist in Gl. (1) notiert. Außerdem wollen wir uns mit der stationären (zeitunabhängigen) Schrödingergleichung sowie dem Variationsprinzip befassen.

2 Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist die zentrale Gleichung der Quantenmechanik, kann jedoch nicht streng mathematisch hergeleitet werden. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet in ihrer

allgemeinsten Form:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

Die Energie einer (klassischen) de-Broglie-Teilchenwelle wird durch

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

beschrieben. p ist der Impuls und m die Masse des Teilchens. $V(\mathbf{x}, t)$ ist das Potential, welches auf das Teilchen wirkt.

a) (i) Welche beiden Energieformen beschreiben die Summanden in Gl. (2)?

(ii) Geben Sie den dreidimensionalen Impuls- sowie Ortsoperator an.

(iii) Stellen Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen auf. Nutzen Sie Gl. (2), um mithilfe des Korrespondenzprinzips den Hamilton-Operator $\hat{H}(\mathbf{x}, t)$ (quantenmechanischer Operator zur Energie) zu bilden.

(iv) Zur Beschreibung der Wellenfunktion wird ein Separationsansatz gewählt:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(x) e^{i\alpha t} \quad (3)$$

Ist die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ zeitabhängig?

$$\rho = \Psi^* \Psi \quad (4)$$

b) Oft wird nicht die Zeitabhängigkeit des Hamilton-Operators betrachtet, sondern nur die stationäre Schrödinger-Gleichung gelöst.

(i) Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung? Leiten Sie diese unter Nutzung des Separationsansatzes (Gl. (3)) aus der zeitabhängigen (Gl. (1)) her. Beachten Sie, dass der Hamilton-Operator nicht mehr zeitabhängig ist. Wie wird α gewählt, um zur stationären Schrödinger-Gleichung zu gelangen?

(ii) Betrachtet wird nun ein Wasserstoff-Atom, wobei r der Abstand zwischen Elektron und Atomkern (Proton) ist. Wie sieht das (elektrostatische) Potential $V(r)$ für dieses System aus? Wie lautet der Hamilton-Operator für die zeitunabhängige Schrödingergleichung?

(iii) Welche Änderungen (zusätzliche Terme, andere Parameter,...) im Vergleich zu (ii) treten auf, wenn der Hamilton-Operator für ein System aus mehreren Elektronen und Atomkernen betrachtet wird?