

Standardbeispiele der Quantenmechanik

Visualisierung von Zuständen im
Potenzialkasten, harmonischen Oszillator, ...

Grundlagen der Quantenmechanik

Der Zustand eines physikalischen Systems wird beschrieben durch eine Zustandsfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$.

Jeder physikalischen Größe entspricht ein Operator, z. B.:

$$\text{Impuls: } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = p_x \psi \quad \text{Energie: } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi$$

Hat eine physikalische Größe den scharfen Wert a , dann ist ψ eine Eigenfunktion des entsprechenden Operators A mit Eigenwert a

In allen anderen Fällen lässt sich ψ als Überlagerung (Summe) von Eigenfunktionen ψ_k schreiben: $\psi = \sum c_k \psi_k$

Eigenfunktionen sind orthogonal: $\int \psi_i^* \cdot \psi_k = 0$, wenn $i \neq k$

$|\psi|^2 = \psi^* \cdot \psi$ kann man als Dichteverteilung interpretieren

Schrödingergleichung

Zustandsfunktionen ψ sind Lösungen der *Schrödingergleichung*

1. zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{p^2/2m} \cdot \psi + \underbrace{V(x, y, z)}_{\text{Potenzial}} \cdot \psi = \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}}_{\text{Energie}} \cdot \psi$$

(entspricht der klassischen Gleichung: $E_{kin} + E_{pot} = E$)

2. zeitunabhängige Schrödingergl. (stationäre Zustände, $E = \text{const.}$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \cdot \psi + V(x, y, z) \cdot \psi = E \cdot \psi$$

Ziel

Visualisieren von $|\psi|^2 = \psi^* \cdot \psi$ für verschiedene Beispiele:

- 1-dimensionales Kastenpotenzial:
$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$
- 2-dim. Kastenpotenzial:
$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$
- Variationen (Potenzialkasten mit Delta-Funktion, Potenzialstufe, veränderlicher Breite,...)
- Vergleich mit harmonischem Oszillator
- Molekülschwingungen

1-dimensionaler Potenzialkasten

Schrödingergleichung:

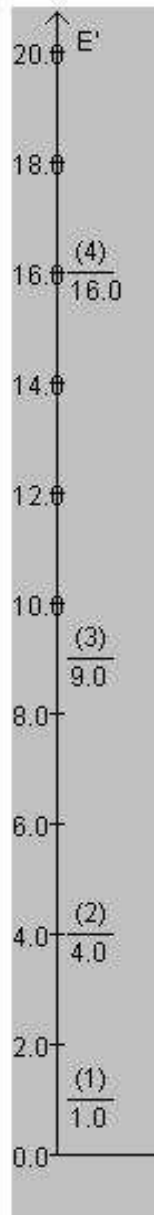
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \psi + V(x) \cdot \psi = E \cdot \psi \quad \text{mit} \quad V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

aus Randbedingungen ($\psi(0) = \psi(a) = 0$) und Normierung

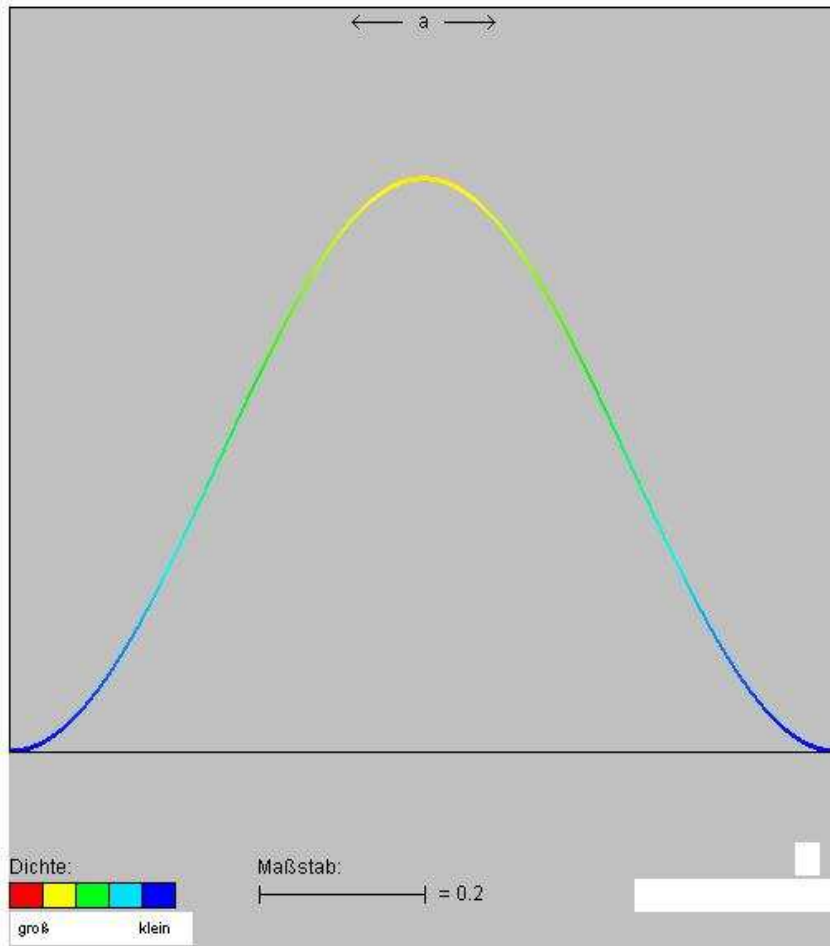
$$\Rightarrow \text{Eigenzustände:} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right)$$

$\Rightarrow |\psi|^2 = \psi^* \psi$ ist zeitunabhängig (stationär)

$$\Rightarrow \text{Energieeigenwerte:} \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$



1-dimensionaler Potenzialkasten



$n = 1$



$n = 3$

2-dimensionaler Potenzialkasten

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Eigenzustände:

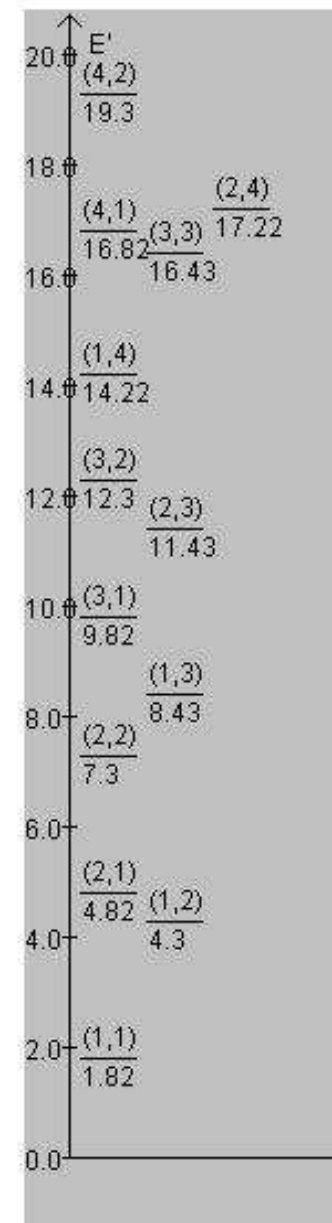
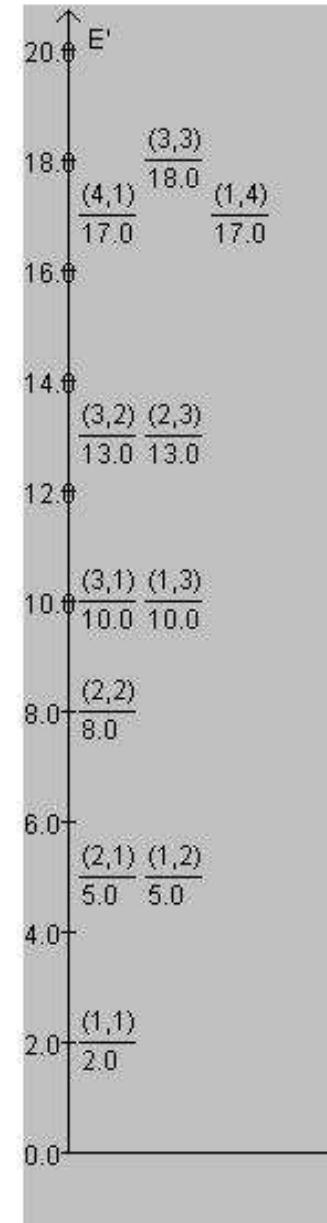
$$\psi_{n,l}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{l\pi}{b} \cdot y\right)$$

Energieeigenwerte:

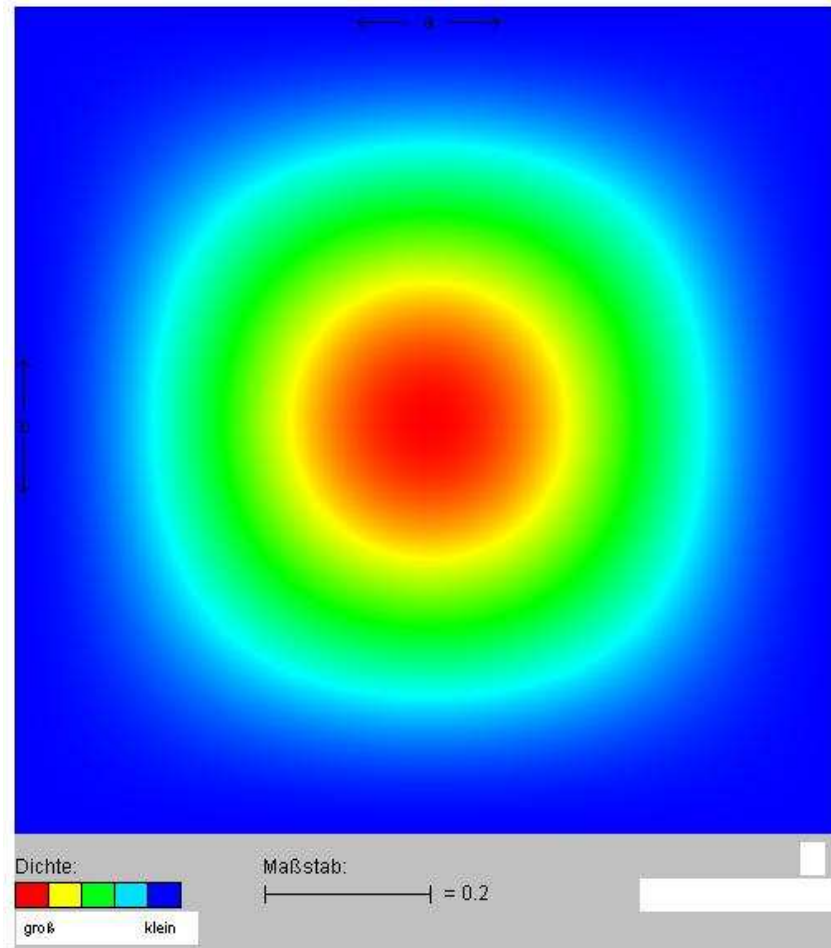
$$E_{n,l} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{l^2}{b^2} \right)$$

Im symmetrischen Potenzialkasten ($a = b$)

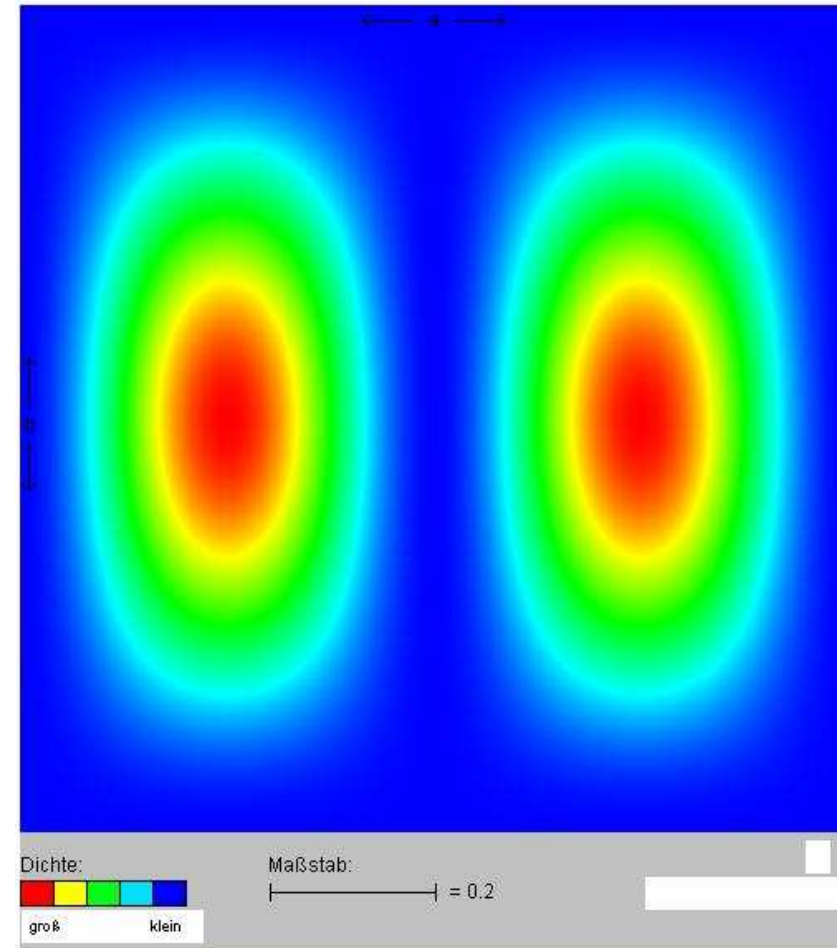
ist $E_{i,k} = E_{k,i}$ (Entartung)



2-dimensionaler Potenzialkasten



$$n = 1, l = 1$$



$$n = 2, l = 1$$

Überlagerte Zustände

ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödingergleichung

$\Rightarrow \psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$ ebenfalls Lösung ($c_1^2 + c_2^2 = 1$ wg. Normierung)

mit $\psi_1(\vec{r}, t) = \varphi_1(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}$ und $\psi_2(\vec{r}, t) = \varphi_2(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}$

$$\text{folgt } |\psi(\vec{r}, t)|^2 = c_1^2 |\varphi_1(\vec{r})|^2 + c_2^2 |\varphi_2(\vec{r})|^2 + 2c_1 c_2 \varphi_1(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) \sin(\omega_{21} t)$$

$$= \xi_A(\vec{r}) + \underbrace{\xi_B(\vec{r}) \cdot \sin(\omega_{21} t)}_{\text{Schwingterm}}$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$\Rightarrow |\psi|^2$ oszilliert, wenn $E_1 \neq E_2$

Überlagerte Zustände

Video: 1-dim. Potenzialkasten Überlagerung $1 \leftrightarrow 2$ (50%)

Video: 2-dim. Potenzialkasten Überlagerung $11 \leftrightarrow 21$ (50%)

Video: 2-dim. Potenzialkasten Überlagerung $21 \leftrightarrow 12$ (1,0/1,0)

Video: 2-dim. Potenzialkasten Überlagerung $21 \leftrightarrow 12$ (1,0/0,9)

Video: 2-dim. Potenzialkasten Überlagerung $21 \leftrightarrow 12$ (1,0/0,8)

Übergänge zwischen Zuständen

Übergang von Zustand ψ_1 in Zustand ψ_2 :

aus $\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$

wird $\psi = c_1(t) \psi_1 + c_2(t) \psi_2$

wobei $c_1(t): 1 \rightarrow 0$ während $c_2(t): 0 \rightarrow 1$

$$(c_1^2 + c_2^2 = 1)$$

In den folgenden Videos macht der Schwingterm $\xi_2(r) \cdot \sin(\omega t)$ während des Übergangs 6 Schwingungen.

Übergänge zwischen Zuständen

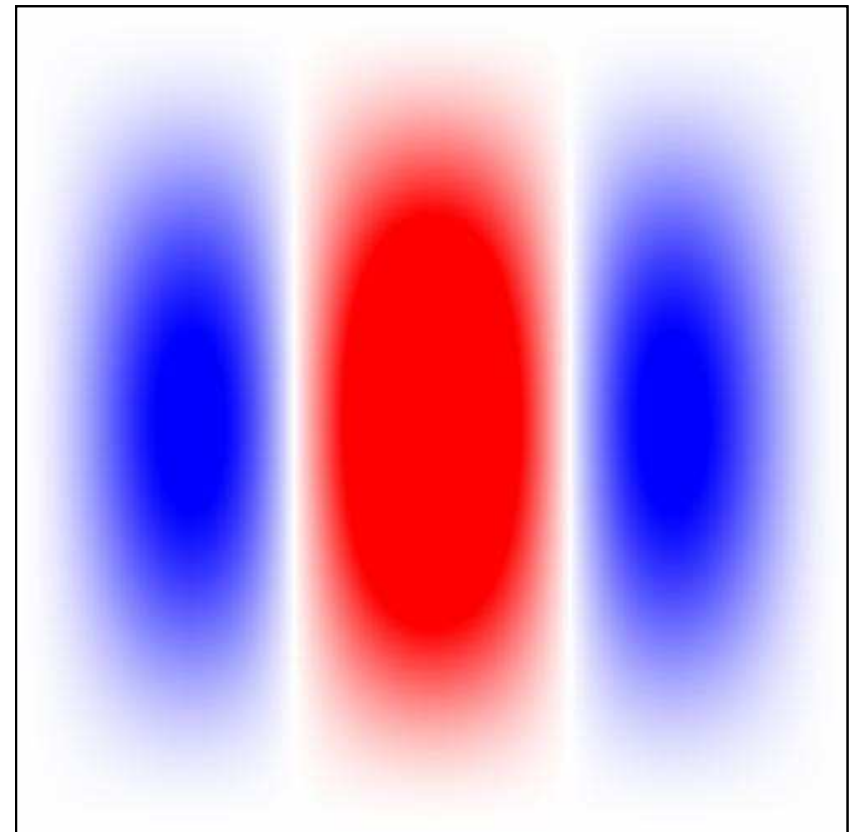
Video: 2-dim. Potenzialkasten Übergang $11 \rightarrow 21$

Video: Übergang $11 \rightarrow 31$

Video: Übergang $21 \rightarrow 32$

Video: Übergang $31 \rightarrow 13$

Video: Übergang $111 \rightarrow 222$
(3-dim. Potenzialkasten)



Schwingterm $11 \rightarrow 31$ (50%)

Delta-Potenzial im Potenzialkasten

In der Mitte des Potenzialkastens wird ein Delta-Potenzial veränderlicher Höhe eingefügt:

- gerade Lösungen (Nullstelle im Zentrum) bleiben unverändert

Video: 1-dim. Potenzialkasten Delta-Funktion bei QZ2

- ungerade Lösungen: in der Mitte nimmt $|\psi|^2$ mit wachsendem Delta-Potenzial ab. ($|\psi|^2$ verschwindet, für Delta-Potenzial $\rightarrow \infty$)

Video: 1-dim. Potenzialkasten Delta-Funktion bei QZ1

Video: 1-dim. Potenzialkasten Delta-Funktion bei QZ3

Potenzialstufe im Potenzialkasten

In der Mitte des Potenzialkastens wird eine Potenzial-Stufe veränderlicher Breite und Höhe eingefügt:

- Potenzialstufe fester Breite wird erhöht: Dichtefunktion kann am Anfang sogar ansteigen, wird aber schließlich nach außen gedrängt

Video: 1-dim. Potenzialkasten Stufenhöhe $0 \rightarrow 50$ bei QZ1

Video: 1-dim. Potenzialkasten Stufenhöhe $0 \rightarrow 750$ bei QZ3

- Potenzialstufe fester Höhe wird verbreitert: Dichtefunktion wird nach außen gedrängt, schwappt aber schließlich nach innen

Video: 1-dim. Potenzialkasten Stufenbreite $0,1 \rightarrow 0,95$ bei QZ1

Verbreiterung des Potenzialkastens

Der Potenzialkasten kann schlagartig oder langsam (adiabatisch) verbreitert werden:

- plötzliche Verbreiterung: System beginnt zu schwingen

Video: 2-dim. Potenzialkasten schlagartig $1,0 \rightarrow 1,5$ bei QZ11

Video: 2-dim. Potenzialkasten schlagartig $1,0 \rightarrow 1,5$ bei QZ31

- adiabatische Verbreiterung: Dichtefunktion „fließt auseinander“

Video: 2-dim. Potenzialkasten adiabatisch $1,0 \rightarrow 1,5$ bei QZ32

Vergleich mit harmonischem Oszillator

$$V(x) = \frac{D}{2} x^2 = \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad \text{bzw.}$$

$$V(x, y) = \frac{m\omega_A^2}{2} x^2 + \frac{m\omega_B^2}{2} y^2$$

Eigenzustände:

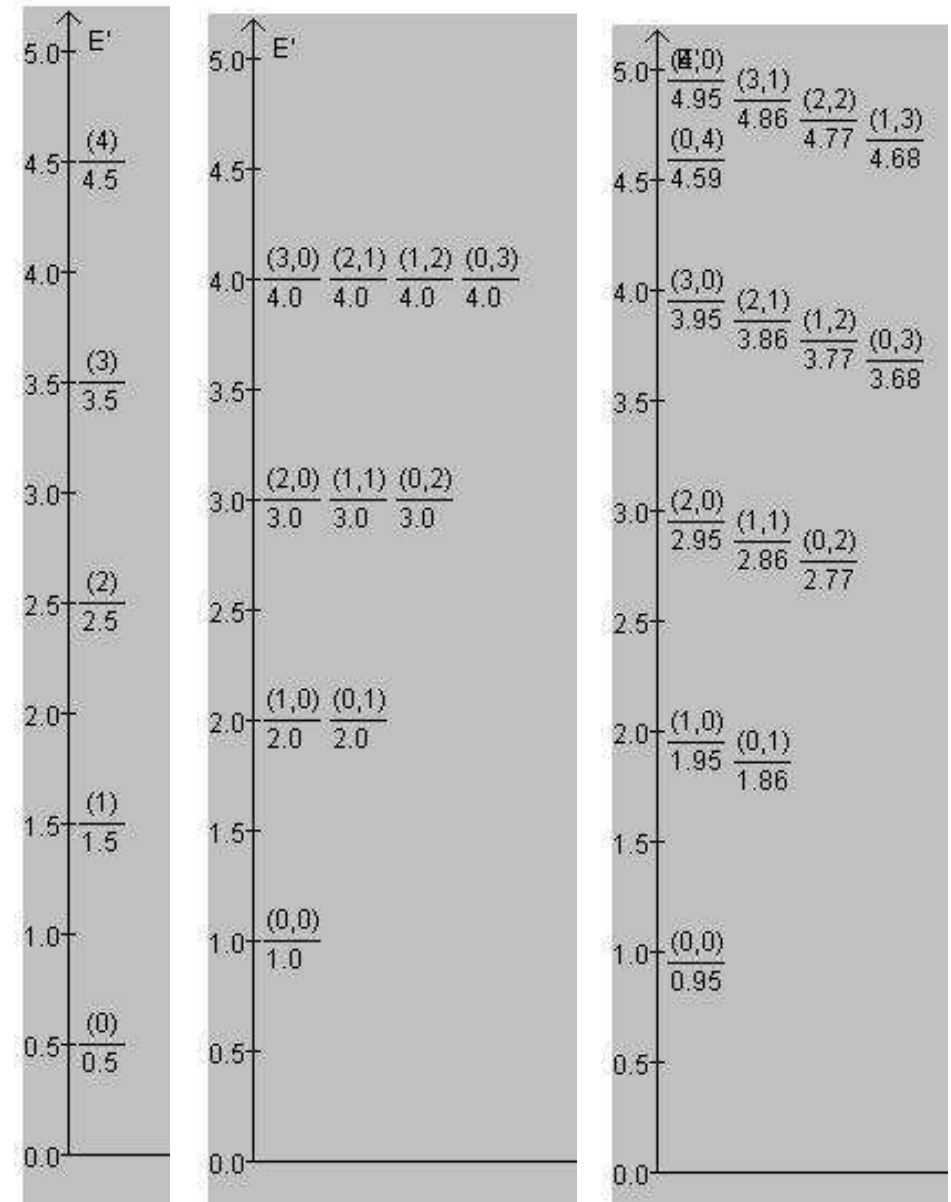
$$\Psi_n = \alpha \cdot H_n(\beta x) \cdot e^{-\gamma x^2} \quad \text{bzw.}$$

(H_n : Hermite-Polynome)

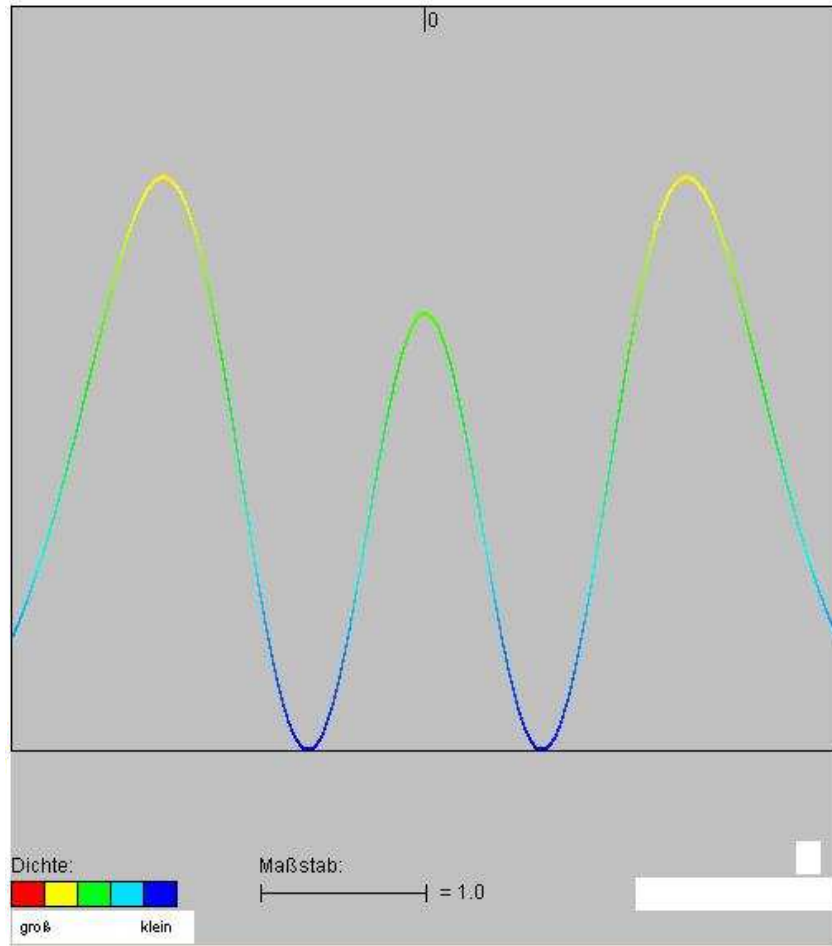
Energieeigenwerte:

$$E_n = \hbar\omega(n + 0,5) \quad \text{bzw.}$$

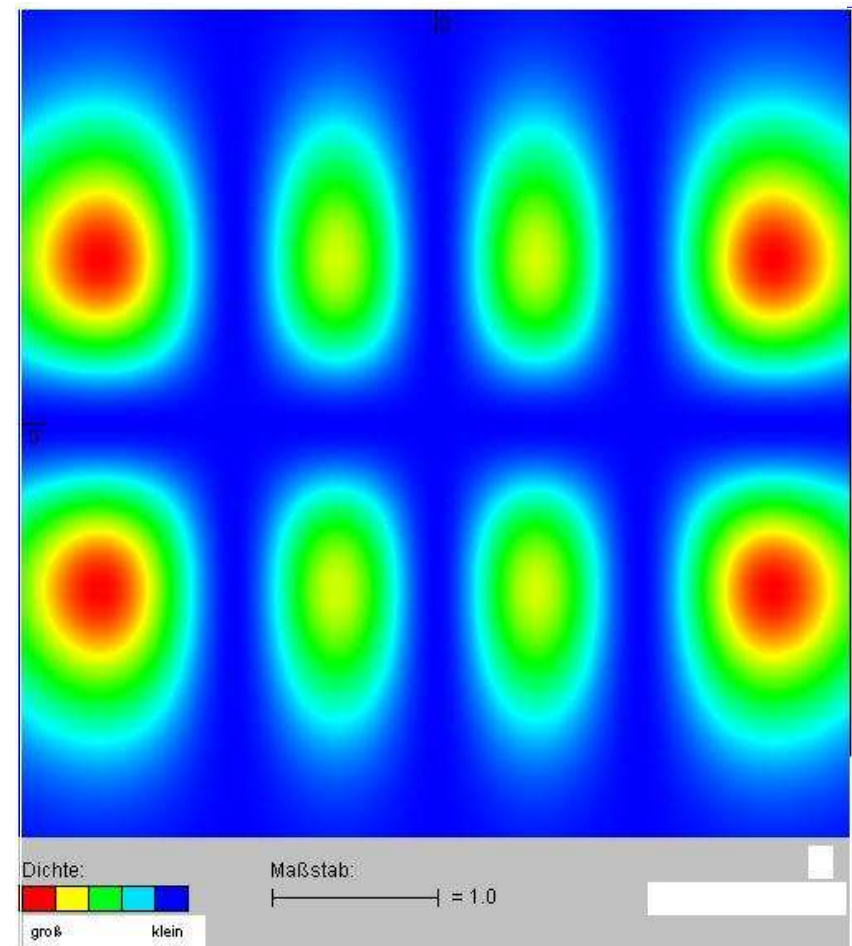
$$E_{n,l} = \hbar\omega_A(n + 0,5) + \hbar\omega_B(l + 0,5)$$



Vergleich mit harmonischem Oszillator



$n = 2$



$n = 3, l = 1$

Vergleich mit harmonischem Oszillator

Video: 2-dim. harmonischer Oszillator Übergang $00 \rightarrow 11$

Video: 2-dim. Potenzialkasten Übergang $11 \rightarrow 22$

Molekülschwingungen

N-atomiges Molekül in der Ebene: $2N$ Freiheitsgrade

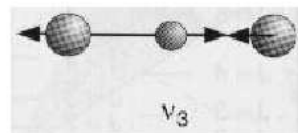
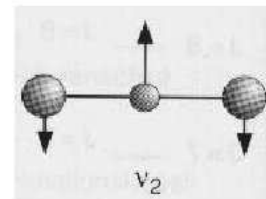
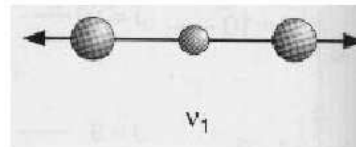
davon $2N-3$ Schwingungsfreiheitsgrade (2 Translation, 1 Rotation)

2-atomiges Molekül:
1 Normalschwingung

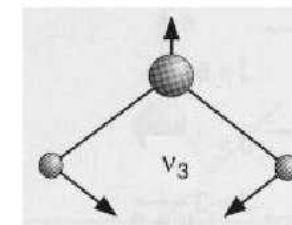
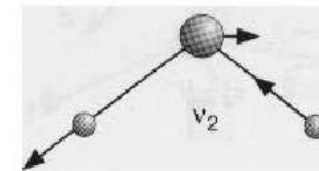
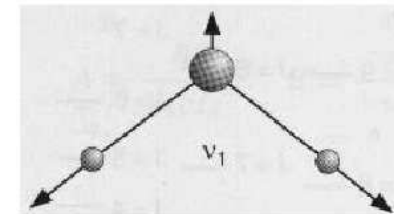


3-atomiges Molekül:
3 Normalschwingungen

linear



gewinkelt



Molekülschwingungen

klassisch:

- Molekülschwingungen: Überlagerung der Normalschwingungen
(Normalschwingung: alle Kerne schwingen harmonisch mit gleicher Frequenz und Phase)

quantenmechanisch:

- man erhält Kerndichtefunktionen (wegen Oszillatorpotenzial wieder Hermite-Polynome)
- die klassischen Schwingungen entsprechen stationären Kerndichtefunktionen
- nur bei Überlagerungen / Übergängen erhält man quantenmechanisch Oszillationen

1. Normalschw.

2. Normalschw.

3. Normalschw.

Grundzustand →

3. Normalschw.