

Einführung in die Quantentheorie

Theoretische Physik II

Klemens Hammerer, Univ. Hannover

Sommersemester 2019

Organisatorisches:

- **Dozent:** Klemens Hammerer
Appelstrasse 2, Raum 114
0511 762 17072
klemens.hammerer@itp.uni-hannover.de
<http://www.hammerer.itp.uni-hannover.de>
- **Übungsleitung:** Dr. Johannes Kleiner
Appelstrasse 2, Raum 209B
0511 762 17342
Johannes.Kleiner@itp.uni-hannover.de
- **Sekretariat:** Birgit Gemmeke
Appelstrasse 2, Raum 115
+49 511 762 17072
Birgit.Gemmeke@itp.uni-hannover.de

Organisatorisches:

- **Vorlesung:**

Dienstag 08:15 - 09:45 & Donnerstag 10:15 - 11:45 Kleiner Physiksaal

- **Plenarübung:** Johannes Kleiner

Donnerstag 08:15 - 09:00, Kleiner Physiksaal

- **Übung:** Geb. 3701, Appelstrasse 2, 2. Stock

1. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 268 Großer Seminarraum

2. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 201

3. Gruppe: Dienstag 12:15 - 13:45 @ Geb. 3701 - 268 Großer Seminarraum

4. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

5. Gruppe: Mittwoch 08:15 - 09:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

6. Gruppe: Mittwoch 12:00 - 13:30 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

7. Gruppe: Dienstag 12:15 - 13:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

Bitte in die Übungsgruppen eintragen!

- **Ablauf des Übungsbetriebes:**

- Montag Abend: Übungsblatt und Präsenzübung auf Stud.IP abrufbar
- Dienstag: Lösungen des Übungsblattes der Vorwoche zu Beginn der Vorlesung abgeben, korrigierte Lösungen der Vorwoche am Ende der Vorlesung mitnehmen.
- Dienstag/Mittwoch: Bearbeiten der Präsenzübung in den Übungsgruppen.
- Donnerstag: Lösung der Übungsaufgaben der Vorwoche in der Plenarübung.

Literatur:

- Quantum Mechanics (**Vol.1 & 2**), **C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe** (Wiley, deutsche Ausgabe bei de Gruyter)
- **Grundkurs Theoretische Physik** (Bd. 5/1 & 5/2), W. Nolting (Springer)
- **Quantenmechanik**, F. Schwabl (Springer)
- **Quantenmechanik Einführung**, W. Greiner (Harri Deutsch)
- **Quantum Mechanics** (Vol.1 & 2), A. Galindo, P. Pascual (Springer)
- Andere: Sakurai, Hecht, Baym, Schiff, Messiah, Griffiths, Merzbacher, Landau-Lifshitz,...
- "Pflichtlektüre": Feynman Lectures on Physics

Skript:

Die Folien werden in der Regel jeweils am Abend vor der Vorlesung auf Stud.IP zugänglich gemacht. Der Inhalt der Vorlesung wird sich weitgehend mit dem der Folien decken. Alle Rechnungen werden im Detail an der Tafel ausgeführt.

Vorbemerkungen

Ziel der Vorlesung ist die Einführung in die (nicht-relativistische) **Quantenmechanik**. Sie

- bildet den theoretischen Rahmen zur Beschreibung der atomaren und subatomaren Physik (Atom-, Molekül-, Festkörper-, Kern- und Elementarteilchenphysik)
- ist die Grundlage für das Verständnis des Aufbaus der Materie
- war der Auslöser wichtiger technischer Entwicklungen, wie zum Beispiel der Halbleitertechnologie, Laser, Kerntechnik, etc.
- erfordert ein neues physikalisches “Weltbild”
- vereinheitlicht das Teilchenbild der klassischen Mechanik und des Wellenbildes der Elektrodynamik

1 Wellenmechanik

1.1 Klassische Physik

(Hamiltonsche) Mechanik

- Der **Zustand** eines Partikels wird durch die Angabe von **Ort** \vec{x} und **Impuls** \vec{p} , d.h. durch einen Punkt (\vec{x}, \vec{p}) im Phasenraum beschrieben
- Seine Dynamik ist durch die **Hamiltonfunktion** $H(\vec{x}, \vec{p})$ und die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

festgelegt.

Z.B. für ein Teilchen der Masse m in einem zeitunabhängigen Potential $V(\vec{x})$ ist die Hamiltonfunktion die Gesamtenergie

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

und die Bewegungsgleichungen

$$\dot{x}_i = \frac{p_i}{m} = v_i \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i$$

- Lösen der Bewegungsgleichungen unter Anfangsbedingungen (\vec{x}_0, \vec{p}_0) zum Zeitpunkt t_0 ergibt die **Trajektorie** $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ des Teilchens. Die Trajektorie legt die Zustände des Teilchens zu beliebigen anderen Zeitpunkten fest.

- Die Messung einer physikalischen **Messgröße** $M(\vec{x}, \vec{p})$ zum Zeitpunkt t liefert das Ergebnis $M(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$. Z.B. Energie $H(\vec{x}, \vec{p})$, Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

Alle diese Punkte müssen in der Quantenmechanik revidiert werden.

Klassische Elektrodynamik

- Elektromagnetische Felder werden durch Angabe des elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$ und magnetischen Feldes $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x})$ beschrieben
- Deren Dynamik ist durch die Maxwellgleichungen festgelegt. In Abwesenheit von Ladung und Strömen, erfüllen die Felder die Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathcal{E}(\vec{x}, t) = 0$$

mit der fundamentalen Lösung

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)},$$

wobei \mathcal{E} eine beliebige Komponente von $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$ darstellt und A die **Amplitude** der Welle bezeichnet. Die physikalische Lösung ist $\text{Re}(\mathcal{E}(\vec{x}, t)) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\vec{x}, t) + \mathcal{E}(\vec{x}, t)^*)$.

- Die **Dispersionsrelation**, d.h. der Zusammenhang zwischen **Kreisfrequenz** $\omega = 2\pi\nu$ und **Wellenvektor** \vec{k} bzw. **Wellenzahl** $k = |\vec{k}|$, lautet für elektromagnetische Wellen (im Vakuum)

$$\vec{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad \text{bzw.} \quad k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}.$$

- Die Wellengleichung ist linear, also gilt das **Superpositionsprinzip**: Jede Linearkombination von Lösungen ist wieder eine Lösung. Die allgemeine Lösung ist eine Superposition

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = \int d^3k A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

wobei $A(\vec{k})$ die Amplitude für Komponente mit Wellenvektor \vec{k} ist.

- Die Energie im elektromagnetischen Feld ist

$$\begin{aligned} E &= \int d^3x \frac{\varepsilon_0}{2} (\mathcal{E}^2(\vec{x}, t) + c^2 \mathcal{B}^2(\vec{x}, t)) \\ &= \int d^3x \varepsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

(wegen $|\mathcal{E}| = c|\mathcal{B}|$) und der Energiefluss (Poynting-Vektor)

$$\vec{S} = \mu_0 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$$

bzw. für skalare Felder

$$|\vec{S}| = c\varepsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t)$$

Gemessen wird (in der Regel) die Intensität. Das ist der zeitlich über eine Periode $T = 2\pi/\omega = 1/\nu$ gemittelte Energiefluss

$$\begin{aligned} I(\vec{x}, t) &= c\varepsilon_0 \frac{1}{T} \int_t^{t+T} dt' \mathcal{E}^2(\vec{x}, t') \\ &= c\varepsilon_0 |\mathcal{E}(\vec{x}, t)|^2 \end{aligned}$$

- Der Nachweis der Wellennatur des elektromagnetischen Feldes im Youngschen Doppelspaltexperiment (Abb. aus Schwabl, Quantenmechanik)

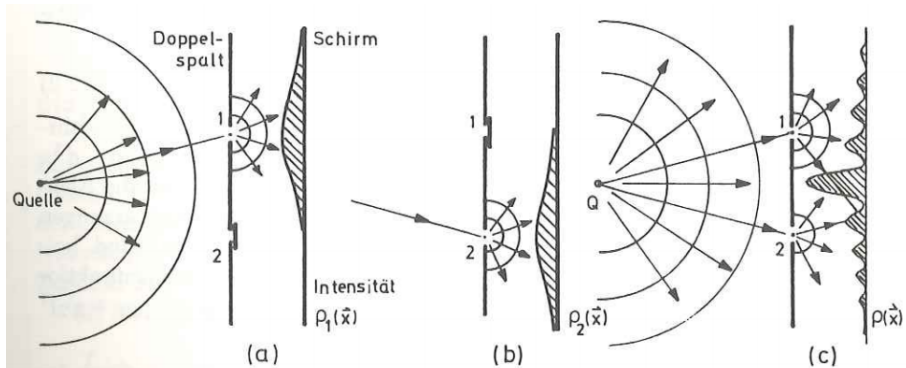


Abb. 2.1. Beugung am Doppelspalt (a) mit Spalt 1 geöffnet, (b) mit Spalt 2 geöffnet, (c) beide Spalte geöffnet

$$\begin{aligned}
 I &\sim |E|^2 \\
 &\sim |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\text{Re}(E_1 E_2^*)
 \end{aligned}$$

Zusammenfassung

Mechanik	Elektrodynamik
Teilchen	Wellen
Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$	Felder $\mathcal{E}(\vec{x}, t), \mathcal{B}(\vec{x}, t)$
Hamiltonsche (Newtonschen) Bewegungsgleichungen	Maxwellgleichungen
Die Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ der Teilchen gehen als Ladungs- und Stromdichten in die inhomogenen Maxwellgleichungen ein; Die Lösungen $\mathcal{E}(\vec{x}, t), \mathcal{B}(\vec{x}, t)$ der Maxwellgleichungen gehen über die Lorentzkraft in die Bewegungsgleichungen der Teilchen ein.	

1.2 Empirische Grundlagen der Quantenmechanik

Wellen haben Teilchencharakter

- Erste Quantenhypothese durch M. Planck (1900) zur Erklärung des Spektrums der **Schwarzkörperstrahlung**: die Energie einer Welle der (Kreis-)Frequenz $\omega = 2\pi\nu$ ist ein ganzzahliges Vielfaches eines elementaren Energiequantums

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Das **Plancksche Wirkungsquantum** h hat die Einheit einer Wirkung = Energie \times Zeit, $[h] = \text{Js}$. Aus Plancks Quantenhypothese ergibt sich das **Plancksche Strahlungsgesetz**. Es beschreibt das empirisch bekannte Spektrum thermischer Strahlung, wenn

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ Js} \qquad \rightsquigarrow \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

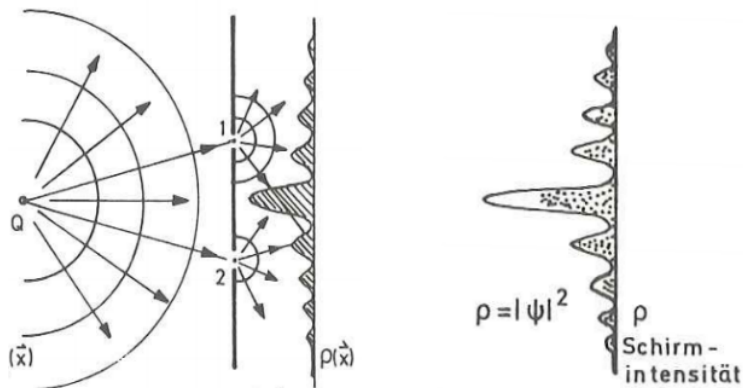
gewählt wird.

- Albert Einsteins Erklärung für den **photoelektrischen Effekt** (1905): Licht der Frequenz ω besteht aus Teilchen der Energie $E = \hbar\omega$ und die Lichtteilchen (Photonen) haben einen Impuls

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (\vec{k} \text{ Wellenvektor})$$

- **Comptoneffekt** (1924, Vergrößerung der Wellenlänge des Licht bei Streuung an Elektronen) kann mit $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ als elastischer Stoß zweier Teilchen erklärt werden.

- Doppelspaltexperiment mit Einzelphotonauflösung (Abb. aus Schwabl, Quantenmechanik)



Interferenz zeigt sich in der Statistik der Detektionsereignisse

Teilchen haben Wellencharakter

- **Bohrsches Atommodell** (1913)

1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen. Sie strahlen dabei keine elektromagnetische Energie ab.
2. Erlaubt sind nur Kreisbahnen mit Drehimpuls

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3$$

3. Elektromagnetische Energie wird nur bei einem Übergang zwischen zwei Kreisbahnen abgestrahlt.

Konsequenzen aus den Bohrschen Postulaten:

- Mit dem Virialsatz

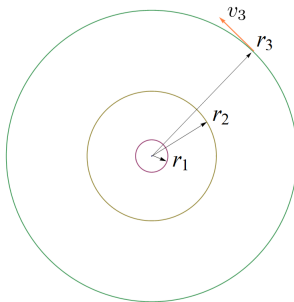
$$E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}E_{\text{pot}} \qquad \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

folgt aus der Forderung $L = mrv = n\hbar$ die Geschwindigkeit und der Radius für die n -te Kreisbahn

$$v_n = \alpha c \frac{1}{n} \qquad r_n = a_0 n^2$$

mit der Feinstrukturkonstant α und dem Bohrradius a_0

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \qquad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m c} \simeq 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



- Die Energie der n -ten Kreisbahn ist

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m\alpha^2 c^2}{n^2}$$

Bei einem Übergang von der n -ten zur m -ten Kreisbahn wird Strahlung emittiert mit einer Frequenz

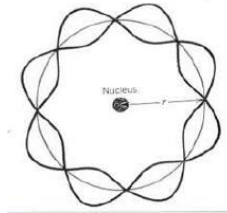
$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

wobei $R = \frac{m\alpha^2 c^2}{2h}$ die Rydbergkonstante ist.

- Luis de Broglie (1924): Die Bewegung eines massiven Teilchens mit Impuls p entspricht einer “Materiewelle” mit einer **de-Broglie-Wellenlänge**

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Damit entsprechen die Bohrschen Kreisbahnen stehenden Wellen der Materiewelle



$$\lambda_n = \frac{h}{mv_n} = 2\pi a_0 n \quad \longrightarrow \quad n\lambda_n = 2\pi a_0 n^2 = 2\pi r_n$$

- Direkter Nachweis der Wellennatur geschieht in Interferenzexperimenten:
 Davission und Germer (1927): Elektronen an Kristallgittern
 Jönssen (1954): Doppelspaltexperiment mit Elektronen
 Interferometrie mit organischen Molekülen <http://www.quantumnano.at/quantum-invaders.7006.html>

1.3 Die Wellenfunktion

[Es folgt eine provisorische und vereinfachte Darstellung der Postulate der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Die exakte und vollständige Darstellung folgt später in Kapitel 2.]

- Die Erfahrung zeigt:
 - Der **Zustand** eines Teilchens wird durch eine (komplexe) **Wellenfunktion**

$$\psi(\vec{x}, t)$$

beschrieben.

- Seine **Dynamik** (zeitliche Entwicklung, Evolution) ist durch die **Schrödingergleichung** festgelegt

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

Die Lösung der Schrödinger Gleichung unter einer Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ ergibt die zeitlich entwickelte Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$.

- Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ legt die **Statistik** der Resultate von Messungen physikalischer Messgrößen $A(\vec{x}, \vec{p})$ zum Zeitpunkt t fest:

Für die Messung der **Position** des Teilchens gilt (Bornsche Regel): Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Volumen d^3x am Ort \vec{x} vorzufinden, ist

$$P(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

D.h. die **Wahrscheinlichkeitsdichte** im Raum ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad ([\rho(\vec{x}, t)] = m^{-3})$$

- Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum vorzufinden, muss 1 sein:

$$1 = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

Wir fordern daher, dass eine als Wellenfunktion in Frage kommende Funktion $\psi(\vec{x}, t)$

- quadratintegrabel und
- auf 1 normiert ist.

Eine Wellenfunktion (für den Bewegungszustand eines Teilchens) ist damit Element des **Hilbertraumes** $L^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegrablen Funktionen,

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}, \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}.$$

- Die **Schrödinger Gleichung für ein freies Teilchen** ($V(\vec{x}, t) \equiv 0$)

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

wird durch **ebene Wellen** gelöst

$$\psi(\vec{x}, t) = c e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

mit $c \in \mathbb{C}$ und der Dispersionsrelation

$$\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}.$$

Mit $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (bzw. $p = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$) ist das äquivalent zu $E = \frac{p^2}{2m}$. Eine ebene Materiewelle mit Wellenvektor \vec{k} beschreibt die Bewegung eines freien Teilchens mit Energie

$$E = \frac{(\hbar \vec{k})^2}{2m}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer ebenen Welle ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = |c|^2 \equiv \text{const.}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist also gleichmäßig im ganzen Raum. Ebene Wellen sind nicht normierbar (nicht Element von $L^2(\mathbb{R}^3)$)! Sie sind keine physikalischen Zustände.

Durch Superposition von ebenen Wellen können normierbare, physikalische Zustände aufgebaut werden, sog. **Wellenpakete**:

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t]}$$

löst die Schrödinger Gleichung, wenn $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$ für beliebige Amplituden $c(\vec{k})$.

Normierung erfordert

$$1 = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3k |c(\vec{k})|^2$$

Das heißt, es muss $c(\vec{k})$ selbst quadratintegabel und normiert sein.

- Die Lösung der Schrödingergleichung für eine vorgegebene Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ erhält man aus der Bedingung

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}}.$$

Also ist $\psi(\vec{x}, 0)$ die Fouriertransformierte von $c(\vec{k})$. Die inverse Transformation ergibt

$$c(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, 0) e^{-i\vec{k}\vec{x}}.$$

Einsetzen der aus der Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ bestimmten Amplituden $c(\vec{k})$ in die allgemeine Lösung ergibt die Wellenfunktion zu Zeiten t

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k}\vec{x} - \omega t]}$$

1.4 Die Impulswellenfunktion

- Die Koeffizienten $c(\vec{k})$ sind die Amplituden der ebenen Wellen $e^{i\vec{k}\vec{x}}$ (mit festem Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$) im Wellenpaket $\psi(\vec{x})$.
Wir erwarten, dass $|c(\vec{k})|^2$ die Wahrscheinlichkeit festlegt, bei einer Messung des Impulses \vec{p} an einem Teilchen im Zustand $\psi(\vec{x})$ den Wert $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ zu finden.
- Allgemein definieren wir die **Impulswellenfunktion** $\varphi(\vec{p}, t)$ bei gegebener **(Raum)Wellenfunktion** $\psi(\vec{x}, t)$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$$

(Damit gilt $\varphi(\vec{p}, 0) = \hbar^{-3/2} c(\vec{p}/\hbar)$.)

Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Impulses einen Wert \vec{p} zu finden ist

$$P(\vec{p}, t) = |\varphi(\vec{p})|^2 d^3p.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum ist

$$|\varphi(\vec{p})|^2.$$

Es gilt

$$\int d^3p |\varphi(\vec{p})|^2 = 1.$$

1.5 Wellenmechanik in einer Dimension

- Wir betrachten im Folgenden die Bewegung eines Teilchens in **einer Dimension**. Sein Zustand wird beschrieben durch eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$ in

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \int dx |\psi(x)|^2 < \infty \right\}.$$

- Eine Teilchen mit Energie $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ wird beschrieben durch eine **ebene Welle**

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

- Ein **Wellenpaket** in einer Dimension ist

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk c(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ und $\int_{-\infty}^{+\infty} dk |c(k)|^2 = 1$. Die zugehörige Impulswellenfunktion ist

$$\varphi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar}$$

Insbesondere für $t = 0$ ist $\varphi(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} c(p/\hbar)$.

- Beispiel: **Gaussches Wellenpaket**

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x - x^2/a^2}$$

mit $k_0, a \in \mathbb{R}$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ort ist

$$\rho(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} e^{-2x^2/a^2}$$

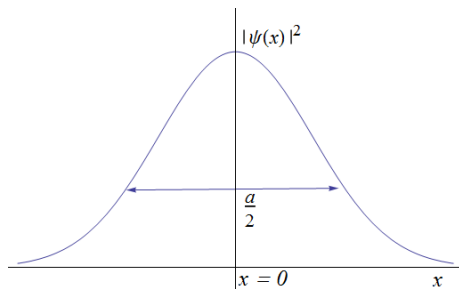
Es gilt:

$$\int dx \rho(x) = 1$$

$$\langle x \rangle = \int dx x \rho(x) = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int dx x^2 \rho(x) = \frac{a^2}{4}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2}$$



- Die Amplituden $c(k)$ sind

$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx} \\ &= \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} e^{-(k-k_0)^2 a^2 / 4} \end{aligned}$$

- Die Impulswellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ ist

$$\varphi(p, 0) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/4} e^{-(p-p_0)^2 a^2 / 4\hbar^2}$$

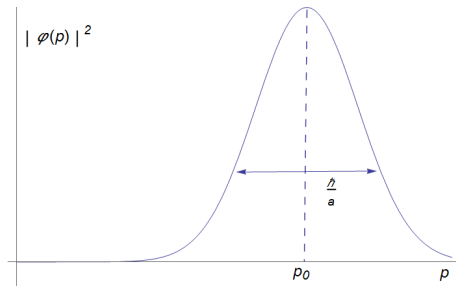
Es gilt:

$$\int dp |\varphi(p, 0)|^2 = 1$$

$$\langle p \rangle = \int dp p |\varphi(p, 0)|^2 = p_0 = \hbar k_0$$

$$\langle p^2 \rangle = \int dp p^2 |\varphi(p, 0)|^2 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{a}$$



Das heißt, dass die Unschärfen in Ort und Impuls nicht unabhängig sind

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

- Das zeitlich entwickelte Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} \frac{e^{i(k_0 x - \varphi)}}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/4}} e^{-\frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\gamma t)}}$$

wobei

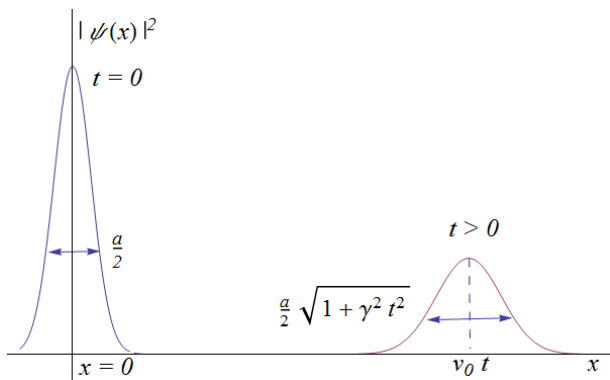
$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} \quad \gamma = \frac{2\hbar}{ma^2} \quad \varphi = \theta + \frac{k_0 v_0 t}{2} \quad \tan 2\theta = \gamma t$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 \\ &= \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \frac{1}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/2}} e^{-\frac{2(x - v_0 t)^2}{a^2(1 + \gamma^2 t^2)}} \end{aligned}$$

mit dem Mittelwert

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= v_0 t \\ \Delta x_t &= \frac{a}{2} \sqrt{1 + \gamma^2 t^2} \end{aligned}$$



- Es gibt keine Änderung des Impulses bzw. der Statistik von Impulsmessungen für ein freies Teilchen und

$$|\varphi(p, t)|^2 = |\varphi(p, 0)|^2$$

1.6 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

- In der Elektrodynamik gilt für die Ladungsdichte $\rho_q(\vec{x}, t)$ und die Stromdichte $\vec{j}_q(\vec{x}, t)$ der Erhaltungssatz (\rightarrow Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0$$

Die Gesamtladung ist erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3x \rho_q(\vec{x}, t) &= - \int_V d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= - \int_{\partial V} d\vec{S} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= 0, \quad \text{für } V \rightarrow \infty \text{ wegen } \lim_{x \rightarrow \infty} \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0 \end{aligned}$$

- In der Quantenmechanik gilt ein entsprechender **Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit**. Wir betrachten die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ &= \dot{\psi}^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \dot{\psi}(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi$$

impliziert

$$-i\hbar\dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*$$

Damit ergibt sich

$$\psi^*\dot{\psi} + \psi\dot{\psi}^* = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\Delta\psi + V\psi^*\psi \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\Delta\psi^* + V\psi\psi^* \right)$$

Also

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*) = 0$$

Wir definieren den **Wahrscheinlichkeitsstrom**

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x}, t) \right) \\ &= \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[\psi^*(\vec{x}, t)(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x}, t) \right]\end{aligned}$$

so, dass

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\vec{\nabla}\psi^* \cdot \vec{\nabla}\psi + \psi^*\Delta\psi - \vec{\nabla}\psi \cdot \vec{\nabla}\psi^* - \psi\Delta\psi^* \right)$$

Damit gilt der **Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit $\int d^3x \rho(\vec{x}, t) = 1$ ist erhalten (Beweis wie in der Elektrodynamik; $\lim_{\vec{x} \rightarrow \infty} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$ weil $\lim_{\vec{x} \rightarrow \infty} \psi(\vec{x}, t) = 0$)

- Beispiel: Der Wahrscheinlichkeitsstrom für eine ebene Welle $\psi(\vec{x}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$ ist

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(i\vec{k})\psi - \psi(-i\vec{k})\psi^* \right) \\ &= \frac{2i\vec{k}\hbar}{2mi} \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \end{aligned}$$

- Beispiel: Superposition zweier ebener Wellen in 1D

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{i(-kx - \omega t)}$$

der Strom ist

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \vec{e}_x$$

1.7 Zeitunabhängige Schrödingergleichung

- Falls das Potential $V(\vec{x})$ nicht explizit von der Zeit abhängt, so ist die Schrödinger Gleichung

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \Psi(\vec{x}, t) \\ &= H(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

$H(\vec{x})$ wird als **Hamiltonoperator** des Systems (Teilchens) bezeichnet.

- Separation der Variablen:** Wir suchen Lösungen der Art

$$\Psi(\vec{x}, t) = \chi(t) \psi(\vec{x})$$

Damit folgt:

$$i\hbar \dot{\chi}(t) \psi(\vec{x}) = \chi(t) H(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \quad \longrightarrow \quad i\hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{H(\vec{x}) \psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} \equiv E$$

mit einer Separationskonstanten E (der Dimension Energie). Also fordern wir

$$i\hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = E \tag{1}$$

$$\frac{H\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} = E \tag{2}$$

- (1) äquivalent zu

$$\dot{\chi}(t) = -i\frac{E}{\hbar}\chi(t) \quad \longrightarrow \quad \chi(t) = e^{-iEt/\hbar}\chi(0) = e^{-iEt/\hbar}$$

- (2) ergibt die **zeitunabhängige Schrödingergleichung**

$$\begin{aligned} H(\vec{x})\psi(\vec{x}) &= E\psi(\vec{x}) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}) &= E\psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Dies ist eine **Eigenwertgleichung**:

- $\psi(\vec{x})$ ist eine **Eigenfunktion (Energieeigenzustand oder stationärer Zustand)** des Hamiltonoperators H .
- E ist der zur Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ gehörende **Eigenwert (Energieeigenwert)**.

Für eine gegebene Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ mit Eigenwert E ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-iEt/\hbar}$$

- Im Allgemeinen besitzt ein Hamiltonoperator mehrere (unendliche viele) Eigenfunktionen und Eigenwerte

$$H\psi_{n,\alpha}(\vec{x}) = E_n\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

n legt die Eigenwerte E_n fest, (n, α) legen die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ fest. α ist ein Entartungsindex, der verschiedene Eigenzustände zum selben Eigenwert unterscheidet. Die Indizes (n, α) können diskret und/oder kontinuierlich verteilt sein. Die Menge der Energieeigenwerte $\{E_n\}$ ist das **Spektrum** des Hamiltonoperators. Das Spektrum kann entsprechend diskret und/oder kontinuierlich sein. [Wir werden alle diese Fälle in Beispielen kennenlernen.]

- Die zeitabhängige Lösung für jede Eigenfunktion ist

$$\Psi_{n,\alpha}(\vec{x}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

Die **allgemeine Lösung der Schrödinger Gleichung** ist eine Superposition der einzelnen Lösungen

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} \Psi_{n,\alpha}(\vec{x}, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} e^{-iE_n t/\hbar} \psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

Die $c_{n,\alpha}$ sind die Amplituden für die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ und ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$ [siehe später].

- Beispiel: Freies Teilchen: Es gilt also $V(\vec{x}) \equiv 0$ also ist der Hamiltonoperator $H(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ und die zeitunabhängige Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Eigenzustände des Hamiltonoperators sind ebene Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

mit zugehörigem Energieeigenwert

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

Der Wellenvektor $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ legt die Eigenzustände und -werte fest.

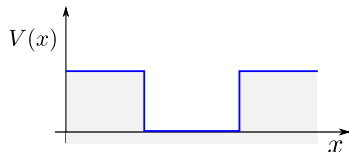
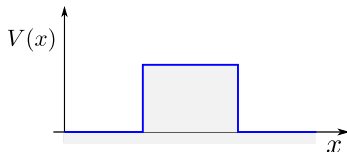
Die allgemeine Lösung lautet

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int d^3k c(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{E_{\vec{k}}}{\hbar}$$

Ist also ein Wellenpaket. Die Amplituden $c(\vec{k})$ ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$.

1.8 Wellenmechanik in einer Dimension mit Potential

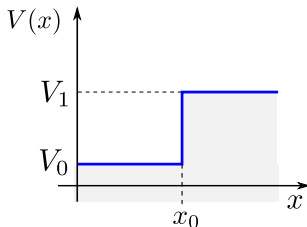
- Die Schrödinger Gleichung soll für stückweise konstante, zeitunabhängige Potential $V(x)$ gelöst werden, also z.B.



Die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung ist

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

Wie verhält sich $\psi(\vec{x})$ an den Sprungstellen von $V(x)$? Sei x_0 eine der Sprungstellen



$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi(x)$$

Integrieren im Intervall $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$ ergibt

$$\begin{aligned} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx (V(x) - E) \psi(x) \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 + \varepsilon) - \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 - \varepsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2} \left[\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0} dx (V_0 - E) \psi(x) + \int_{x_0}^{x_0 + \varepsilon} dx (V_1 - E) \psi(x) \right] \\ &= \frac{2m}{\hbar} \left[(V_0 - E) \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0} dx \psi(x) + (V_1 - E) \int_{x_0}^{x_0 + \varepsilon} dx \psi(x) \right] \end{aligned}$$

Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ ist:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 + \varepsilon) - \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 - \varepsilon) \rightarrow 0$$

Die Ableitung der Wellenfunktion an der Sprungstelle des Potentials ist **stetig**.

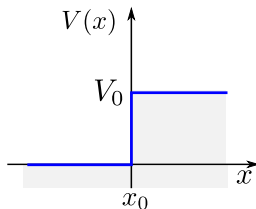
Damit ist auch die Wellenfunktion selbst an der Sprungstelle stetig.

An Sprungstellen x_0 von $V(x)$ gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 + \varepsilon) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 - \varepsilon) \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 + \varepsilon) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_0 - \varepsilon) \end{aligned}$$

Potentialstufe

- Gegeben sei ein Potential der Form



$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \quad (\text{I}) \\ V_0, & x > 0 \quad (\text{II}) \end{cases}$$

Wir suchen die Eigenfunktionen und Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödinger Gleichung

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

d.h. in den Bereichen (I) und (II) gilt:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) \quad (\text{I})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi(x) \quad (\text{II})$$

- **1.Fall:** Das Teilchen habe eine **Energie oberhalb der Potentialstufe**, $E > V_0$.

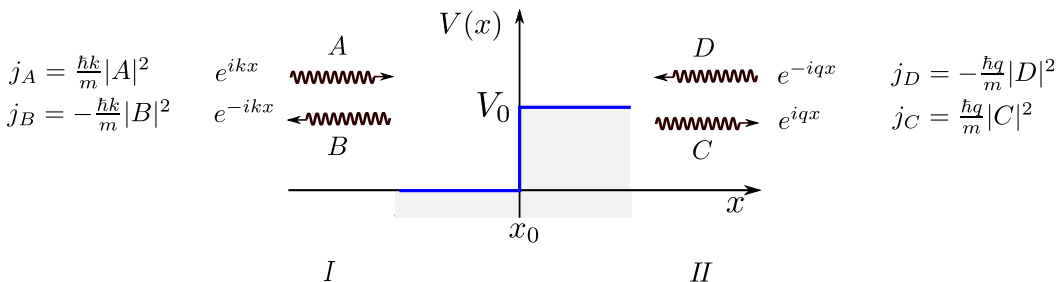
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad q := \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} < k$$

Die Lösungen in (I) und (II) sind dann

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (I)$$

$$\psi(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx} \quad (II)$$

mit beliebigen Amplituden A, B, C, D



- Die Anschlussbedingungen an der Sprungstelle sind

$$A + B = C + D \quad (a)$$

$$ik(A - B) = iq(C - D) \quad (b)$$

Die Amplituden B, C der auslaufenden Wellen sollen in Abhängigkeit von den Amplituden der einlaufenden Wellen A, D bestimmt werden:

$$B - C = -A + D$$

$$kB + qC = kA + qD$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ k & q \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{k+q} \begin{pmatrix} q & 1 \\ -k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ k & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- Wir betrachten den Fall eines von links einlaufenden Teilchen, d.h. $A \neq 0$ und $D = 0$ (sodass $j_A \neq 0$ und $j_D = 0$). Damit ist

$$B = \frac{k - q}{k + q} A \qquad C = \frac{2k}{k + q} A$$

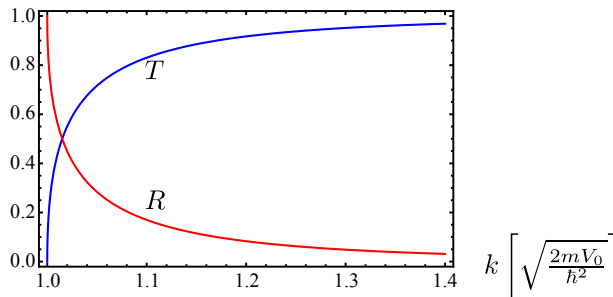
Damit sind die Ströme

$$\begin{aligned} j_A &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \\ j_B &= \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k - q}{k + q} \right)^2 |A|^2 = \left(\frac{k - q}{k + q} \right)^2 j_A \\ j_C &= \frac{\hbar q}{m} \left(\frac{2k}{k + q} \right)^2 |A|^2 = \frac{4kq}{(k + q)^2} j_A \end{aligned}$$

- Die **Reflexions- und Transmissionskoeffizienten** für ein von links mit einem Impuls $p = \hbar k$ (bzw. mit einer kinetischen Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > V_0$) einfallenden Teilchens sind

$$\begin{aligned} R &= \frac{j_B}{j_A} = \left(\frac{k - q}{k + q} \right)^2 & q &= \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \\ T &= \frac{j_C}{j_A} = \frac{4kq}{(k + q)^2} & & \left(\text{Annahme: } k > \frac{2mV_0}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Es gilt $R + T = 1$



Für Energien $E > V_0$ gibt es eine endliche Wahrscheinlichkeit, reflektiert zu werden!

- Das **Eigenwertproblem**

$$H\psi_k(x) = E_k\psi_k(x) \qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ist (für Wellen mit $E > V_0$ und $D = 0$, $A = 1$) gelöst mit

$$\psi_k = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k-q}{k+q} e^{-ikx}, & x < 0 \\ \frac{2k}{k+q} e^{ikx}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Durch Superposition dieser Wellen können von links einlaufende Wellenpakete konstruiert werden

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk g(k) e^{-i\omega_k t} \psi_k(x)$$

- **2.Fall:** Das Teilchen habe eine **Energie unterhalb der Potentialstufe**, $E < V_0$.

Die Schrödingergleichung ist nun

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad (I)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) \quad (II)$$

Mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \mu := \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

lauten die Lösungen in (I) und (II)

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (I)$$

$$\psi(x) = C e^{-\mu x} + D e^{\mu x} \quad (II)$$

Die Lösungen in (I) sind wieder ebene Wellen. In (II) ergeben sich Exponentialfunktionen.

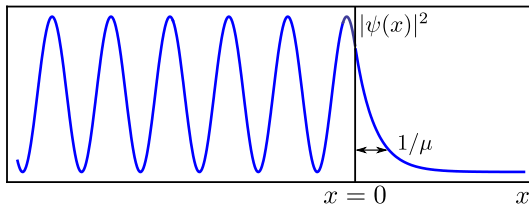
- Die Komponente $e^{+\mu x}$ divergiert für $x \rightarrow \infty$. Die Wellenfunktion muss normierbar sein. Also fordern wir $D \equiv 0$.

Die Anschlussbedingungen bei $x = 0$ liefern dann für den Fall eines von links einlaufenden Teilchens

$$B = \frac{k - i\mu}{k + i\mu} A \qquad C = \frac{2k}{k + i\mu} A$$

Die Energieeigenfunktion zum Energieeigenwert $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ lautet damit ($A = 1$)

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k-i\mu}{k+i\mu} e^{-ikx}, & x \leq 0 \\ \frac{2k}{k+i\mu} e^{-\mu x}, & x > 0 \end{cases}$$



- Die Wahrscheinlichkeitsdichte in $x > 0$ ist

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \mu^2} e^{-2\mu x} = \frac{4E}{V_0} e^{-2\mu x}$$

Die **Eindringtiefe** ist

$$\frac{1}{\mu} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Die Eindringtiefe ist klein für grosse Massen und hohe Potentiale $V_0 \gg E$.

- Insbesondere für eine **unendlich hohe Potentialstufe** $V_0 \rightarrow \infty$ gilt

$$\psi(x) \propto \begin{cases} \sin kx, & x < 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases}$$

Das heisst, die Randbedingung für eine unendlich hohe Potentialstufe bei x_0 ist

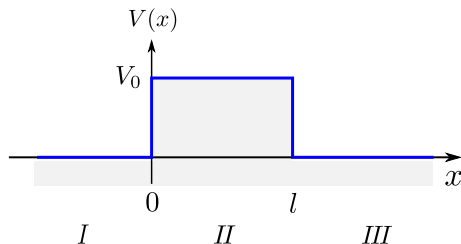
$$\psi(x_0) = 0$$

Die Ableitung der Wellenfunktion ist in x_0 unstetig!

Potentialschwelle

- Wir betrachten ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & 0 \leq x \leq l \\ 0, & l \leq x \end{cases}$$



- 1. Fall** Das Teilchen habe eine Energie **oberhalb der Potentialschwelle**, $E > V_0$. Die Lösung der Schrödinger Gleichung in den 3 Bereichen ist

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (I)$$

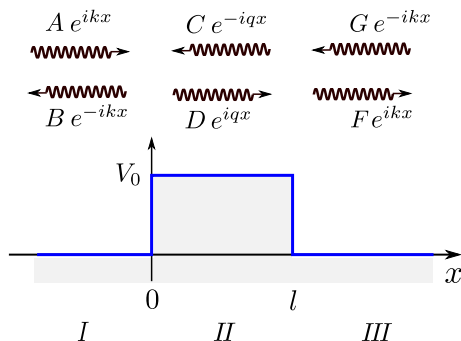
$$\psi(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx} \quad (II)$$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad (III)$$

wobei

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$q := \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} < k.$$



- Die Anschlussbedingungen erfordern Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ bei $x = 0$ und $x = l$

$$A + B = C + D$$

[Stetigkeit von $\psi(0)$]

$$k(A - B) = q(C - D)$$

[Stetigkeit von $\psi'(0)$]

$$C e^{iq l} + D e^{-iq l} = F e^{ik l} + G e^{-ik l}$$

[Stetigkeit von $\psi(l)$]

$$q(C e^{iq l} - D e^{-iq l}) = k(F e^{ik l} - G e^{-ik l})$$

[Stetigkeit von $\psi'(l)$]

Die auslaufenden Wellen B, F sollen für gegebene einlaufende Wellen A, G berechnet werden. Wir können uns auf ein von links einlaufendes Teilchen spezialisieren, $G = 0$.

Die Lösung (mit Matrixmethode, wie vorher) ist:

$$F = \left[\cos ql - i \frac{k^2 + q^2}{2kq} \sin ql \right]^{-1} e^{-ikl} A$$

$$B = i \frac{q^2 - k^2}{2kq} \sin ql e^{ikl} F$$

- Der transmittierte/reflektierte Strom ist

$$j_F = \frac{\hbar k}{m} |F|^2 \qquad j_B = \frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

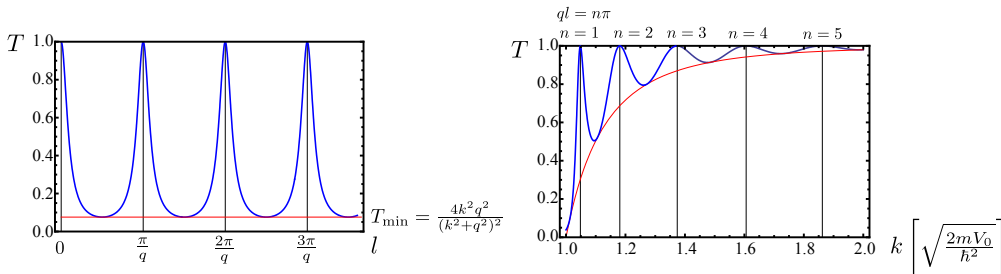
und der **Reflexions- und Transmissionskoeffizient**

$$R = \frac{j_B}{j_A} = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}$$

$$T = \frac{j_F}{j_A} = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}$$

Diskussion:

- Es gilt $R + T = 1$.
- Transmissionskoeffizient gegen Breite l der Schwellen (für feste Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ des Teilchens und Potentialhöhe V_0)



- Die Transmission besitzt sog. **Streuresonanzen** bei

$$\sin ql = 0 \quad \text{also} \quad ql = n\pi \quad n \in \mathbb{N}$$

also für eine Wellenzahl $q = \frac{n\pi}{l}$. Im Bereich der Barrieren entstehen dann stehende Wellen.

- **2. Fall:** Wir betrachten ein Teilchen mit **Energie unterhalb der Potentialschwelle**, $E < V_0$. Die Lösung in (II) ist nun (wie vorher)

$$\psi(x) = Ce^{-\mu x} + De^{+\mu x}, \quad 0 \leq x \leq l \quad (\text{II})$$

Die Lösung ist die gleiche wie für $E > V_0$ mit $q \rightarrow i\mu$, $\mu = \sqrt{(V_0 - E) \frac{2m}{\hbar^2}}$. Der Reflexions- und Transmissionskoeffizient ist

$$R = \frac{(k^2 + \mu^2)^2 \sinh^2 \mu l}{4k^2 \mu^2 + (k^2 + \mu^2)^2 \sinh^2 \mu l}$$

$$T = \frac{4k^2 \mu^2}{4k^2 \mu^2 + (k^2 + \mu^2)^2 \sinh^2 \mu l}$$

Diskussion

- $T \neq 0$ sogar für $E < V_0$: **Tunneleffekt**
- Für 'kleine' Energien E und 'lange' Barrieren l , so dass

$$\mu l = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} l \gg 1$$

gilt

$$T \approx \frac{16(E - V_0)}{V_0^2} e^{-2\mu l}$$

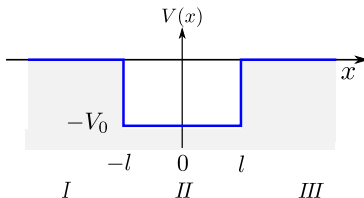
Die Eindringtiefe ist wieder

$$\frac{1}{\mu} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

- **Beispiel 1:** Für ein Elektron mit Energie $E = 1 \text{ eV}$ und Potentialhöhe $V_0 = 2 \text{ eV}$ ist die Eindringtiefe $\mu^{-1} \approx 2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2 \text{ \AA}$. Bei einer Barriere mit $l = 1 \text{ \AA}$ ist die Transmissionswahrscheinlichkeit $T = 0,78$.
- **Beispiel 2:** Für ein Proton ($m_p = 1840 m_e$) mit $E = 1 \text{ eV}$ und $V_0 = 2 \text{ eV}$ ist $\mu^{-1} = 5 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ und für $l = 1 \text{ \AA}$ ist $T = 4 \cdot 10^{-19}$.

Der Potentialtopf

- Wir betrachten ein Potential der Form



$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| \leq l \\ 0, & |x| > l \end{cases}$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

Die Zustände mit $E > 0$ entsprechen im wesentlichen denen der Potentialschwelle (für $E > V_0$). Welche Zustände mit $E < 0$ gibt es im Potentialtopf?

- Für $-V_0 < E < 0$ sind die Lösungen in den 3 Bereichen

$$\psi(x) = Ae^{\mu x} \quad (\text{I})$$

$$\psi(x) = B \cos kx + C \sin kx \quad (\text{II})$$

$$\psi(x) = De^{-\mu x} \quad (\text{III})$$

mit:

$$\mu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad (E < 0)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$$

Dabei haben wir

- in (I) die Lösungen proportional zu $e^{-\mu x}$ und in (III) proportional zu $e^{+\mu x}$ ausgeschlossen (Normierbarkeit!)
- in (II) die Lösungen $\cos kx$ und $\sin kx$ statt $e^{\pm i k x}$ verwendet (Vereinfachung).

- Die Stetigkeitsbedingungen verlangen

$$Ae^{-\mu l} = B \cos kl - C \sin kl \quad (3)$$

$$Ae^{-\mu l} = \frac{k}{\mu}(B \sin kl + C \cos kl) \quad (4)$$

$$De^{-\mu l} = B \cos kl + C \sin kl \quad (5)$$

$$De^{-\mu l} = \frac{k}{\mu}(B \sin kl - C \cos kl) \quad (6)$$

Addition und Subtraktion von (3) und (5) bzw. (4) und (6) ergeben

$$A + D = 2Be^{\mu l} \cos kl = 2B \frac{k}{\mu} e^{\mu l} \sin kl$$

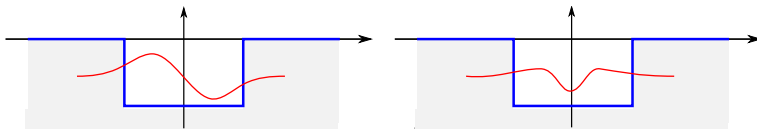
$$D - A = 2Ce^{\mu l} \sin kl = -2C \frac{k}{\mu} e^{\mu l} \cos kl$$

Damit muss gelten

$$B \left(\tan kl - \frac{\mu}{k} \right) = 0$$

$$C \left(\frac{1}{\tan kl} + \frac{\mu}{k} \right) = 0$$

- Es gibt zwei Klassen von Lösungen:
 - i) Falls $B \neq 0$ muss $\tan kl = \frac{\mu}{k}$ und daher $C = 0$ gelten.
 - ii) Falls $C \neq 0$ muss $\tan kl = -\frac{k}{\mu}$ und daher $B = 0$ gelten.
 - i) entspricht einer spiegelsymmetrischen Wellenfunktion
 - ii) entspricht einer spiegel-antisymmetrischen Wellenfunktion



- Für **symmetrische Wellenfunktionen** [Fall (i)] muss gelten $\tan kl = \frac{\mu}{k}$, bzw.

$$\tan \sqrt{\frac{2ml^2(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{|E|}{V_0 - |E|}} \quad (7)$$

Dies ist eine nicht-triviale Bedingung an die Energie der Zustände. Die Gleichung ist transzendent, kann aber grafisch ermittelt werden:

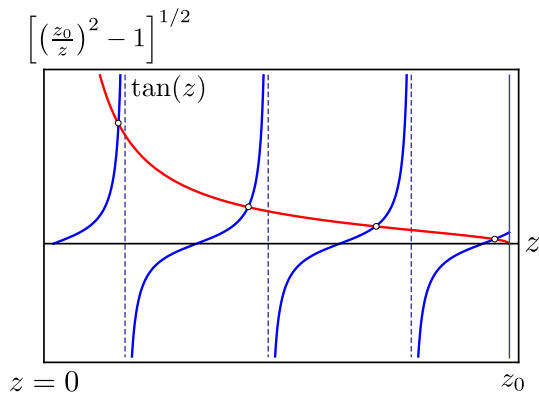
Wir definieren

$$z(E) := \sqrt{\frac{2ml^2(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \quad z_0 := \sqrt{\frac{2ml^2V_0}{\hbar^2}} \quad 0 \leq z \leq z_0$$

Die letzte Bedingung gilt wegen der Annahme $-V_0 \leq E \leq 0$.

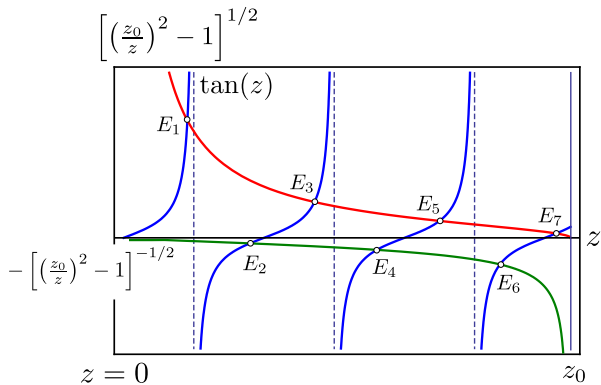
Damit ist wegen $\frac{|E|}{V_0 - |E|} = \frac{z_0^2 - z^2}{z^2} = \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1$ die Bedingung (7) an die Energie E äquivalent zu

$$\tan z = \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}$$



- Für **antisymmetrische Wellenfunktionen** [Fall (ii)] muss $\tan kl = -\frac{k}{\mu}$ gelten, bzw.

$$\tan z = - \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^2 - 1 \right]^{-1/2}$$



Diskussion:

- Für gegebene Potentialtiefe V_0 (d.h. z_0) gibt es eine bestimmte Anzahl an **diskrete Energien** E_n mit $n = 1, 2, \dots, n_{\max}$. Das heisst, die Energie gebundener Zustände (im Topf) ist **quantisiert**.
- Zustände ψ_n zu Energieeigenwerten E_n sind symmetrisch für n ungerade und antisymmetrisch für n gerade.
- Für jedes beliebig kleine V_0 gibt es mindestens einen Zustand.
- Je tiefer das Potential, desto mehr Zustände gibt es.
- Für den **unendlich tiefen Potentialtopf** $V_0 \rightarrow \infty$ (d.h. $\mu \rightarrow 0$ und $z_0 \rightarrow \infty$) entsprechen die Zustände stehenden Wellen proportional zu $\cos k_n x$ bzw. $\sin k_n x$ für n ungerade bzw. gerade mit Wellenzahlen $k_n = \frac{n\pi}{2l}$ und Energien $E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$.

1.9 Der Impulsoperator

- Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\varphi(\vec{p}, t)|^2$ für Impulsmessungen ergibt sich aus der Impulswellenfunktion $\varphi(\vec{p}, t)$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

Wir können die Statistik von Impulsmessungen auch direkt aus $\varphi(\vec{x}, t)$ berechnen.
Es gilt z.B. für den Mittelwert einer Impulsmessung

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} \rangle &= \int d^3p \vec{p} |\varphi(\vec{p}, t)|^2 = \int d^3p \varphi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \varphi(\vec{p}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x' \int d^3x \int d^3p \psi^*(\vec{x}', t) e^{i\vec{p}'\cdot\vec{x}'/\hbar} \vec{p} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \psi(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

Wir verwenden nun die Identität $\vec{p}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} = i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x' \int d^3x \psi^*(\vec{x}', t) \psi(\vec{x}, t) (i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \int d^3p e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})/\hbar} \\ &= \int d^3x' \int d^3x \psi^*(\vec{x}', t) \psi(\vec{x}, t) (i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}) \\ &= \int d^3x' \int d^3x \left[\psi^*(\vec{x}', t) (-i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \psi(\vec{x}, t) \right] \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ &= \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) (-i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \psi(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

Also:

$$\langle\vec{p}\rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) (-i\hbar\vec{\nabla}) \psi(\vec{x}, t)$$

Entsprechend gilt für beliebige höhere Momente der Impulskomponenten p_k

$$\langle p_k^n \rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \right)^n \psi(\vec{x}, t)$$

- Wir identifizieren daher den Differentialoperator $(-i\hbar\vec{\nabla})$ mit dem Impuls:

Impulsoperator in Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}$$

[Um ein Symbol explizit als Operator zu kennzeichnen, wird ein Hut (\hat{p}) verwendet.]

Damit folgt zum Beispiel für den **Operator der kinetischen Energie** und den **Hamiltonoperator**

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

Die **Stromdichte** ist

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m}\text{Re}\left(\psi^*(\vec{x}, t)(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x}, t)\right) = \frac{1}{2m}\text{Re}\left(\psi^*\hat{\vec{p}}\psi\right)$$

1.10 Zusammenfassung

- Der **Zustand** eines Teilchens wird beschrieben durch eine (Orts-) **Wellenfunktion** $\psi(\vec{x}, t)$.
 - $P(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|$ ist die **Wahrscheinlichkeitsdichte** im Ortsraum.
 - Die **Wellenfunktion** ist quadratintegrabel und normiert $\int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1$.
 - Ortswellenfunktionen sind Elemente von

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}, \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}.$$

- Die **Impulswellenfunktion** $\varphi(\vec{p}, t)$ und ist die Fourier-Transformierte der Ortswellenfunktion

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

$P(\vec{p}, t) = |\varphi(\vec{p}, t)|$ ist die **Wahrscheinlichkeitsdichte** im Impulsraum.

Der Operator für den Impuls ist

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{x}}$$

- Die **Dynamik** wird durch die **Schrödinger Gleichung**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

beschrieben mit dem **Hamiltonoperator** \hat{H} des Systems. Für die Bewegung eines Teilchens in einem Potential $V(\vec{x}, t)$ lautet dieser

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t)$$

- Aus der Schrödingergleichung folgt ein **Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

mit dem Wahrscheinlichkeitsstrom $\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \text{Re} \left(\psi^* \hat{p} \psi \right)$.

- Für **zeitunabhängige Potentiale** $V(\vec{x}, t) \equiv V(\vec{x})$ führt ein Separationsansatz

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar}$$

auf die **zeitunabhängige Schrödingergleichung**

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Dies ist ein **Eigenwertproblem** und besitzt im Allgemeinen mehrere Lösungen

$$H\psi_{n,\alpha}(\vec{x}) = E_n\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

Die Indizes (n, α) können – je nach Potential – diskret und/oder kontinuierlich sein. α ist ein Entartungsindex. Die $\psi_{n,\alpha}$ sind die **(Energie-)Eigenzustände** bzw. **stationären Zustände** und die E_n die **(Energie-)Eigenwerte** des Hamiltonoperators.

- Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung ist eine **Superposition** der Eigenzustände

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} \psi_{n,\alpha}(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Die Amplituden $c_{n,\alpha} \in \mathbb{C}$ ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$.