

Teil I

Einführung in die Quantenmechanik

1 Teilchen und Wellen

1.1 Klassische Physik

1.1.1 Mechanik (Teilchentheorie)

(Abb 1)

Newton:

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{p}(t)}{dt} &= \vec{F}(t) \\ \vec{p}(t) &= m \frac{d\vec{r}(t)}{dt}\end{aligned}$$

1.1.2 Elektrodynamik („Feldtheorie“)

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t), \vec{B}(\vec{r}, t), \varrho(\vec{r}, t), \vec{j}(\vec{r}, t)$$

Verknüpfung durch die Maxwell-Gl.

$$\varrho(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \text{ Ladungsdichte}$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N q_i \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \text{ Stromdichte}$$

Kraft auf Teilchen

$$\vec{F}_i = q_i \left(\vec{\mathcal{E}}_i + \vec{v}_i \times \vec{B}_i \right)$$

Wellenerscheinungen $\Rightarrow \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = 0$ Wellengleichung im Vakuum

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta$$

Analog für Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r}, t)$

„Einfache“ Lösung: „ebene Welle“

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) &= \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k}) \cdot t)} \\ \omega(\vec{k}) &= c |\vec{k}| = c \cdot k\end{aligned}$$

$$\text{Superposition (lineare Dgl)} \quad \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = \int \underbrace{\tilde{\mathcal{E}}(\vec{k})}_{\text{folgt aus Randbedingungen}} \cdot e^{i\left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \underbrace{c \cdot k}_{\omega} \cdot t\right)} d^3 k$$

Wellenpaket

1.1.3 Wellencharakter

- Beugung
- Brechung
- Interferenz

1.1.4 Bemerkungen

- $\vec{\mathcal{E}}$ -Feld als ebene Welle $\rightarrow \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\omega} (\vec{k} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t))$

- Allgemein:

Energie des Feldes im Volumen V

$$E = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V \left| \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r + \frac{1}{\mu_0} \frac{1}{2} \int_V \left| \vec{B}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r$$

Ebene Welle: $E = \epsilon_0 \int_V \left| \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r$

„Energie ist proportional zu $\left| \vec{\mathcal{E}} \right|^2$ “

Impuls eines elektromag. Feldes

$$\vec{P}_{Feld} = \epsilon_0 \int_V \left(\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right) d^3r$$

Ebene Welle: $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega} \epsilon_0 \int_V \mathcal{E}^2(\vec{r}, t) d^3r$

$$\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega} E$$

1.2 Vorstufe der Quantenmechanik („Ältere Quantentheorie“)

(1900 - 1925)

1.2.1 Teilchencharakter des Lichts (el-mag Strahlung)

Hohlraumstrahlung (Abb 2)

„Schwarzer Körper“ Strahlung wird vollständig absorbiert

Energieverteilung $u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^2} \cdot h \cdot \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$

ν : Wellenfrequenz

T : Temperatur

k_B : Boltzmann-Konstante

$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

Erklärung durch Planck mit folgender Annahme:

Elektromagnetische Strahlung wird (von den Atomen in den Wänden) in Form von „Quanten“ der Energie $E = h\nu \cdot n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) abgegeben

„Quantenhypothese von Max Planck“

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

Photoeffekt (1905) (Abb 3)

Energie pro Elektron

$$E = \underbrace{a}_{\text{universell}} \cdot \omega - \underbrace{W}_{\text{materialspezifisch}} \quad (\text{exp Resultat}) \quad a = \hbar$$

- Zahl der emittierten Elektronen proportional zur Intensität
- Kinetische Energie hängt von Frequenz ab
- Unterhalb einer Schwellfrequenz treten keine Elektronen aus

Einstein Licht $\hat{=}$ „Ansammlung“ von Energiequanten mit $E = \hbar\omega$ (Lewis 1986: „Photon“)

Festkörper: (Abb 4)

- Energie des Photon wird komplett an Elektron abgegeben
- Intensität des Lichts bestimmt die Anzahl der emittierten Elektronen

Impuls Feld: $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega} \underbrace{E}_{\text{Energie des Feldes}}$

P von Photon:

$\vec{P}_{Photon} = \frac{\vec{k}}{\omega} \hbar\omega = \hbar\vec{k}$
--

Impuls eines Lichtquants

1.2.2 Vorstellung des Aufbaus von Atomen

Materie: „Summe“ von Atomen

Atom: Kern + Elektronen

Experimentelle Beobachtung beim Wasserstoffatom Emission $\hat{=}$ Linienspektrum

Energie: $\Delta E_{n,m} = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \cdot 13,6059\text{eV}$

Rutherford-Modell (Abb 5)

$|\text{Zentrifugalkraft}| = |\text{Coulombkraft}|$

$$\frac{mv^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (1)$$

Energie: $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

Probleme:

- Ausdehnung der Atome (d.h. r) ist nicht bestimmbar
- Beschleunigte Elektronen (Kreisbahn) strahlen nach klassischer Elektrodynamik Energie ab
- Alle Energien sind möglich (Widerspruch zu Linienspektren)

Bohr'sches Atommodell Zusatzannahmen:

- Drehimpuls ist quantisiert: $|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar \quad n = 1, 2, \dots$
- Bei festem n erfolgt Umlauf „strahlungslos“
- Beim Wechsel der Kreisbahn von $|\vec{L}| = n\hbar$ nach $|\vec{L}| = n'\hbar$ wird Energie $\Delta E = E_n - E_{n'}$ abgegeben

$|\vec{L}| = mvr \stackrel{!}{=} n\hbar \Rightarrow v$ dann (1) mit $m \cdot r^3$ multipliziert

$$\Rightarrow E_n = - \underbrace{\frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}}_{13,6059\text{eV}} \frac{1}{n^2}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{n,m} = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \cdot 13,6059\text{eV}$$

1.3 Materiewellen

Problem: Klassische Physik beschreibt „Mikrowelt“ nicht genau

Stand der Physik 1923

	Licht	Materie
„klassische“ Experimente	Bei Ausbreitung <u>Wellencharakter</u> → Maxwell-Gl	Makroskopische Körper: <u>Teilchencharakter</u> → Newton-Gl
„nicht klassische“ Experimente	Bei Emission und Absorption: <u>Teilchencharakter</u> $E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}$	Verhalten auf atomarer Ebene Materiewelle? de Broglie (1923)

→ „Welle-Teilchen-Dualismus“

Auch für massive, freie Teilchen sollen die von Einstein für Lichtquanten postulierten Zusammenhänge zwischen Energie und Frequenz, bzw. Impuls und Wellenvektor gelten:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Hypothese von de Broglie

$$\text{Energie: } E = \frac{p^2}{2m} \underset{\text{de B.}}{=} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \underset{\text{de B.}}{=} \hbar\omega \Rightarrow$$

$$\underbrace{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}}_{\text{Dispersionsrelation}} \quad (2)$$

Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$v_{\text{Gruppe}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

2 Wellenmechanik des freien Teilchens

2.1 Wellengleichung

Idee: Ordne Teilchen eine Wellenfunktion zu $\psi(\vec{r}, t)$

Freies Teilchen

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(k)t)} \quad (3)$$

$$\text{mit } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

- Lässt sich eine Vorschrift zur Berechnung von $\psi(\vec{r}, t)$ angeben?
- Welche physikalische Bedeutung hat $\psi(\vec{r}, t)$?

2.1.1 Motivation einer Wellengleichung

Elektrodynamik: Wellengleichung $\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \mathcal{E}(\vec{r}, t) = 0$

Betrachte $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi(\vec{r}, t), \quad \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) = i\vec{k} \psi(\vec{r}, t), \quad \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) = -k^2 \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{mit } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \frac{\hbar k^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t)$$

⇒

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

„Schrödinger-Gleichung für freies Teilchen“ $\hat{=}$ Differentialgleichung

- 1. Ordnung in der Zeit
- 2. Ordnung im Ort

\Rightarrow Angabe von $\psi(\vec{r}, t = t_0)$ legt Lösung vollständig fest

- Die Wellengleichung ist linear in $\psi(\vec{r}, t)$
 \Rightarrow Superpositionsprinzip
- ist homogen

Beachte: $\psi = \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$ oder $\psi = \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$ sind keine Lösungen der Wellengleichung

Bis auf den Spezialfall $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$ sind die Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}, t)$ komplex.

ψ komplex $\rightarrow \psi$ ist vermutlich nicht direkt mit physikalischer Größe verknüpft

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ reel \rightarrow Beschreibt $|\psi|^2$ die Dichte des Teilchens? (Idee von Schrödinger)

Ebene Welle $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \right|^2 = |\psi_0|^2 \hat{=}$ Teilchen wäre über den ganzen Raum gleichmäßig verschmiert

Idee: Wellenpaket beschreibt Teilchen

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int f(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(k)t)} d^3k \quad (5)$$

2.2 Wellenpaket

2.2.1 Eindimensional

Idee: Teilchen sei bei $t = 0$ am Ort $x = 0$

(Abb 5)

$$|\psi|^2 = \delta(x) \rightarrow \psi = \sqrt{\delta(x)} \underbrace{e^{i\varphi}}_{\text{Phasenfaktor}}$$

$\sqrt{\delta(x)}$ ist schlecht zum Rechnen. Daher:

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\gamma}} e^{-\frac{x^2}{\gamma^2}} = \delta(x)$$

Also:

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{\gamma}} e^{-i\frac{x^2}{2\gamma^2}} \cdot e^{ik_0 x}$$

Wie verändert sich $\psi(\vec{r}, t)$ im Laufe der Zeit?

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} dk \quad (6)$$

Bei $t = 0$:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{ikx} dk$$

$$\Rightarrow f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

(Umkehrung der Fouriertransformation)

2.2.2 Hilfsintegral

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} e^{i\beta x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}$$

für $\alpha > 0$

$$\Rightarrow f(k) = \frac{\sqrt{j}}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2} \gamma^2}$$

Einsetzen in (6) liefert (analog zu Aufgabe T2)

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{4\alpha}} e^{ik_0 \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)}$$

mit $\alpha = \frac{\gamma^2}{2} + i \frac{\hbar}{2m} t$

$\psi \sim$ Normierungsfaktor Gausfunktion: Ebene Welle

(Abb 7)

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\gamma}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{2|\alpha|} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{4} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha^*}\right)}$$

$$\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha^*} = \frac{\gamma^2}{|\alpha|^2}$$

2.2.3 Breite B des Wellenpakets

(Abb 8)

$$\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right) = \frac{4|\alpha|^2}{\gamma^2} \Rightarrow x_1, x_2$$

$$B = x_1 - x_2 = \frac{4|\alpha|}{\gamma} = \frac{4}{\gamma} \left(\frac{\gamma^4}{4} + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$B = 2\gamma \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \gamma^4}}$$

mit $T^2 := \frac{m^2 \gamma^4}{\hbar^2}$ „Zerfallszeit“

$$B = 2\gamma \sqrt{1 + \frac{t^2}{T^2}}$$

(Abb 9)

→ Wellenpaket läuft auseinander

→ Interpretation von $|\psi(x, t)|^2$ als Materiedichte würde bedeuten, dass das Teilchen zerfließt.

Widerspruch zu experimenteller Erfahrung

Idee: Born

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t zu finden

1. Elektron: $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, Radius: $r = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, $\gamma = r$
 $T = 6,8 \cdot 10^{-23} \text{ s}$
2. Bleikugel: $m = 0,1 \text{ g}$, $r = 1,3 \cdot 10^{-3} \text{ m}$, $\gamma = r$
 $T = 1,6 \cdot 10^{+24} \text{ s} = 5,1 \cdot 10^{16} \text{ Jahre}$

2.3 Bedeutung der Wellenfunktion

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 \neq \text{Materiedichte}$

2.3.1 Doppelspaltexperiment

(Abb 10)

(Folie Internet)

„Auftrittspunkte“ einzelner Photonen sind zufällig.

Viele Photonen \rightarrow regelmäßiges Beugungsbild

Auftreffen erfolgt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

Betragsquadrat $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen

Max Born (1926)

Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumen V zu finden

$$W(V) = \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$$

2.3.2 Normierung

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

$\Rightarrow \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3r = 1 \rightarrow \psi(\vec{r}, t)$: quadratintegrierbare Funktion

\Rightarrow Wellenfunktion fällt im „Unendlichen“ schnell ab

2.3.3 Periodische Funktion

Normierung auf Volumen V

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

Ebene Welle: $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\Rightarrow |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi_0|^2 \cdot 1$$

Normierung auf Volumen $V \Rightarrow \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \underbrace{\text{Phasenfaktor}}_{\text{wird typischerweise zu „Eins“ gewählt}}$

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{1}{V}$$

2.3.4 Wellenpaket

Bei $t = 0$ ist das Teilchen bei $\vec{r} = 0$ lokalisiert

$t > 0$: Wellenpaket zerfließt $\Rightarrow |\psi(\vec{r}, t)|^2$ wird „breiter“ \Rightarrow Kenntnis über Aufenthaltsort wird immer ungenauer

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \Rightarrow$ Zeitliches Verhalten von $\psi(\vec{r}, t)$ ist streng deterministisch.

Ort und Impuls sind nicht gleichzeitig genau bestimmbar

2.4 Quantenmechanische Erwartungswerte

2.4.1 Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Zufällige Größen X_1, X_2, \dots, X_N können N Werte annehmen

Wahrscheinlichkeit, dass X_i auftritt: w_i

1. $0 \leq w_i \leq 1$
2. $w_i = 1$ (sicheres Ergebnis)
3. $\sum_{i=1}^N w_i = 1$ (Normierung)

Mittelwert (mathematischer Erwartungswert)

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \sum_{i=1}^N x_i w_i \\ \langle f(x) \rangle &= \sum_i f(x_i) w_i\end{aligned}$$

Streuung

$$\begin{aligned}S &= \left\langle \left(\langle x \rangle^2 - x \right)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \langle x \rangle^2 - 2x \langle x \rangle + x^2 \right\rangle \\ &= \langle x \rangle^2 - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x^2 \rangle \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2\end{aligned}$$

Unschärfe, Unsicherheit

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

Wahrscheinlichkeitsdichte Zufällige Größe, deren Wertebereich kontinuierlich ist

Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Wertes x ist durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$ bestimmt

1. $0 \leq w(x) dx \leq 1$
2. $w(x) = \delta(x - x_0)$ d.h. x_0 tritt immer auf
3. $\int_{-\infty}^{\infty} w(x) dx = 1$

\Rightarrow Mittelwert: $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot w(x) dx$ allg. $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) w(x) dx$. Streuung und unsicherheit wie oben

2.4.2 Quantenmechanik

$$\varrho(\vec{r}, t) := |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Erwartungswert des Ortes

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \vec{r} \varrho(\vec{r}, t) d^3 r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3 r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) d^3 r\end{aligned}$$

Allgemein

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) f(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) d^3 r$$

2.5 Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

2.5.1 Plausibilitätsbetrachtung

Freies Teilchen: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

Allg. Lösung der Schrödingergleichung mit $\omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} d^3 k \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 k\end{aligned}$$

$$\tilde{\psi}(\vec{k}, t) = f(\vec{k}) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}$$

Umkehrung

$$\tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3 r$$

Annahme: $|\tilde{\psi}(\vec{k}, t)|^2$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte für Wellenvektor \vec{k}

$\Rightarrow |\tilde{\psi}(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t)|^2$ ist Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Impuls

Es gilt $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1 \Rightarrow |\tilde{\psi}(\vec{k}, t)|^2 = 1$

Denn:

Betrachte $f(\vec{r})$, $g(\vec{r})$ und ihre Fouriertransformaten $\tilde{f}(\vec{k})$, $\tilde{g}(\vec{k})$

$$\int_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{f}^*(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k}) d^3 k$$

Parsewalsches Theorem

Beweis

$$\begin{aligned}
 \text{LS} &= \int_{\mathbb{R}}^{\star} f(\vec{r}) g(\vec{r}) d^3 r \\
 &\stackrel{\text{Def. FT}}{=} \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} f(\vec{r}) \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{g}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 k \\
 \text{RS} &= \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{f}(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k}) d^3 k \\
 &\stackrel{\text{Def. FT}}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3 r \right)^{\star} \tilde{g}(\vec{k}) d^3 k \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} f(\vec{r}) \tilde{g}(\vec{k}) e^{+i\vec{k}\vec{r}} d^3 \cdot d^3 r \\
 &= \text{LS}
 \end{aligned}$$

Mit $f = \psi$, $g = \psi$ folgt

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \psi(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3 r &= \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \psi(\vec{k}, t) d^3 k \\
 \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r &= \int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\psi}(\vec{k}, t)|^2 d^3 k
 \end{aligned}$$

und somit die gemeinsame Normierung

2.5.2 Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \langle \vec{k} \rangle = \hbar \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi} \dots$$

$$, \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

$$\begin{aligned}
 d^3 k = \frac{d^3 p}{\hbar^3} &= \hbar \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{\vec{p}}{\hbar} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{d^3 p}{\hbar^3} \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \vec{p} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{d^3 p}{\hbar^3}
 \end{aligned}$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{\tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right)}{\hbar^{\frac{3}{2}}}$$

„Wellenfunktion im Impulsraum“

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\varphi}(\vec{p}, t) \vec{p} \varphi(\vec{p}, t) d^3 p$$

Erwartungswert des Ortes

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \psi(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) d^3 r$$

Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) d^3 k$$

2.6 Impulsoperator

Frage: Lässt sich $\langle \vec{p} \rangle$ auch direkt im Ortsraum berechnen?

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k \\ \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \vec{\nabla} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) i\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k\end{aligned}$$

Da

$$\int_{\mathbb{R}^3}^* f(\vec{r}, t) g(\vec{r}, t) d^3r = \int_{\mathbb{R}^3}^* \tilde{f}(\vec{k}, t) g(\vec{k}, t) d^3k$$

folgt mit $f = \psi$, $\tilde{f} = \tilde{\psi}$, $g = (\vec{\nabla} \psi)_j$, $\tilde{g} = (i\vec{k}\tilde{\psi})_j$, $j = 1, 2, 3$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3}^* \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) d^3r &= \int_{\mathbb{R}^3}^* \tilde{\psi}(\vec{k}, t) i\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) d^3k \\ &= \frac{1}{\hbar} \langle \vec{p} \rangle\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3}^* \psi(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) d^3r$$

Idee: Impuls wird im „Ortsraum“ durch den Operator $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ dargestellt. Das $\hat{}$ deutet Operator-Charakter an.

$\hat{\vec{p}}$: Impulsoperator

Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$

In „Ortsdarstellung“ gilt $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$

Lässt sich $\langle \vec{r} \rangle$ auch direkt aus $\tilde{\psi}(\vec{k}, t)$ berechnen?

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\vec{k}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r \\ \vec{\nabla}_{\vec{k}} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r}, t) (-i\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r\end{aligned}$$

Dann folgt

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3}^* \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \left(-\frac{1}{i} \right) \vec{\nabla}_{\vec{k}} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) d^3k$$

Mit $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, $\phi(\vec{p}, t) = \frac{\tilde{\psi}(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t)}{\hbar^{\frac{3}{2}}}$, $\vec{\nabla}_{\vec{k}} = \hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}$ folgt:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(\vec{p}, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

Idee: Ort ist im „Impulsraum“ durch $\hat{\vec{r}} = -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}}$ gegeben. $\vec{\nabla}_{\vec{p}} = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$

Es gilt:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

$\Rightarrow \hat{\vec{p}} = \vec{p}$ in „Impulsdarstellung“

$\phi(\vec{p}, t)$: Wellenfunktion im Impulsraum

\Rightarrow Quantenmechanische Erwartungswerte haben allgemein die Form

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{O} \psi(\vec{r}, t) d^3 r$$

(Ortsdarstellung)

bzw.

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \phi^*(\vec{p}, t) \hat{O} \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

(Impulsdarstellung)

Dabei bedeutet \hat{O} :

Physikalische Größe	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
Ort \vec{r}	\vec{r}	$-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} = i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}$
Impuls \vec{p}	$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right)$	\vec{p}
Drehimpuls $\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}$	$\vec{r} \times \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) = \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla})$	$i\hbar (\vec{\nabla}_{\vec{p}} \times \vec{p})$

Zentrale Idee für den Aufbau der Quantenmechanik:

Physikalische Größen werden durch Operatoren dargestellt

3 Allgemeine Prinzipien der Quantenmechanik

3.1 Schrödingergleichung

Bisher: freies Teilchen $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$

Ebene Welle: $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$

LS:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = i\hbar (-i\omega) \psi = \underbrace{\hbar\omega}_{=\text{Energie } E} \psi(\vec{r}, t)$$

Da $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ folgt

$$\left(\hat{\vec{p}} \right)^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 = (\hat{p})^2$$

folgt

$$\text{RS} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$$

Klassische Mechanik

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\vec{p})^2}{2m}$$

3.1.1 Teilchen im Potential $V(\vec{r})$

Klassisch: $e = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$

Darstellung der Energie durch \vec{p} und \vec{r} entspricht Hamiltonfunktion

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

Freies Teilchen:

$$H(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{p^2}{2m}$$

Quantenmechanik

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

\Rightarrow

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

\hat{H} : Hamiltonoperator

Schrödinger postulierte 1926, dass für ein freies Teilchen in einem Potential $V(\vec{r})$ die Wellenfunktion durch folgende Gleichung bestimmt wird

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \end{aligned}$$

Schrödingergleichung für Teilchen im Potential $V(\vec{r})$

\hat{H} ; „Hamiltonoperator“

Der Hamiltonoperator entsteht aus der Hamiltonfunktion durch „Ersetzen“ der Koordinaten \vec{r} und \vec{p} durch Operatoren

$$\begin{array}{ccc} H(\vec{p}, \vec{r}) & \longrightarrow & \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}) \\ \text{klassische Mechanik} & & \text{Quantenmechanik} \\ & & (\text{Ortsdarstellung } \hat{\vec{r}} = \vec{r}, \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) \end{array}$$

Dies gilt z.B. auch für zeitlich veränderliches Potential $V(\vec{r}, t) \Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

\hat{H} kann folgende Formen annehmen

1. Abstrakte Darstellung: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$
2. Ortsdarstellung: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$
3. Impulsdarstellung: $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(i\hbar \vec{\nabla} \vec{p}, t)$

Konzept:

1. Stelle Hamiltonfunktion H auf
2. Gehe von H zum Hamiltonoperator \hat{H}
3. Löse die Schrödingergleichung $\rightarrow \psi(\vec{r}, t)$
4. Berechne Erwartungswerte der physikalischen Größen

3.2 Operatoren und Kommutatoren

Operator \hat{O} :

$$\hat{O}\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t)$$

Operator „verändert“ die Funktion ψ nach φ

Beispiele

1. Impulsoperator $\hat{O} = \hat{\vec{p}}$: $\hat{\vec{p}}\psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)$
2. Ortsoperator $\hat{O} = \hat{\vec{r}}$: $\hat{\vec{r}}\psi(\vec{r}, t) = \vec{r}\psi(\vec{r}, t)$
3. Einheitsoperator $\hat{O} = \hat{1}$: $\hat{1}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)$
4. Inversionsoperator $\hat{O} = \hat{I}$: $\hat{I}\psi(\vec{r}, t) = \psi(-\vec{r}, t)$
5. Translation um Vektor \vec{d} : $\hat{O} = \hat{T}_{\vec{d}}$: $\hat{T}_{\vec{d}}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r} + \vec{d}, t)$

Achtung: in der Regel ist die Reihenfolge von Operatoren in Rechnungen wichtig

Klassisch: Ort x und Impuls p_x in x -Richtung $xp_x = p_xx \Rightarrow xp_x - p_xx = 0$

Quantenmechanik:

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}_x\psi(\vec{r}, t) &= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r}, t) \\ \hat{p}_x\hat{x}\psi(\vec{r}, t) &= \hat{p}_x(\hat{x}\psi(\vec{r}, t)) \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi(\vec{r}, t)) \\ &= \frac{\hbar}{i}\psi(\vec{r}, t) + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r}, t)\end{aligned}$$

Operatoren wirken auf alles, was rechts von ihnen steht!

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi(\vec{r}, t) - \hat{p}_x\hat{x}\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar\psi(\vec{r}, t)$$

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi(\vec{r}, t) = i\hbar\psi(\vec{r}, t)$$

Der Gehalt dieser Gleichung wird durch folgende Kurzschreibweise zum Ausdruck gebracht

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

Definition:

Für Operatoren \hat{A} und \hat{B} bezeichnet man

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

als Kommutator von \hat{A} und \hat{B}

Erinnerung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\psi(\vec{r}, t)}_{\text{Wellenfkt. „Zustand“}} = \underbrace{\hat{H}}_{\text{Hamiltonoperator}}\psi(\vec{r}, t)$$

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

Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar \\
[\hat{y}, \hat{p}_x] &= 0 \\
[\hat{y}, \hat{p}_y] &= i\hbar
\end{aligned}$$

Denn

$$\hat{y}\hat{p}_x\psi(\vec{r}, t) = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{p}_x\hat{y}\psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (y\psi(\vec{r}, t)) = \frac{\hbar}{i} y \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}, t)$$

\Rightarrow

$$(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y})\psi(\vec{r}, t) = 0$$

\Rightarrow

$$[\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$$

3.2.1 Insgesamt

$$[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{j,k}$$

mit $j, k = 1, 2, 3$

Vertauschungsrelation für Ort und Impuls

3.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

In einer Dimension:

$$\varrho(x, t) = \psi^*(x, t) \psi(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) \quad (7)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \hat{H}^* \psi^*(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{V(x, t)}_{\text{reelles Potential}} \right) \psi^*(x, t) \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(x, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) \right) \psi(x, t) + \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

Mit (7) + (8)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \varrho(x, t) &= \left(-\frac{1}{i\hbar} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi^*(x, t) \right) \psi(x, t) \right) \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) \right) \psi^*(x, t) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left(\psi^*(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x, t) - \psi(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi^*(x, t) \right)
\end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}\psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \\ \frac{\partial \varrho(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\frac{\hbar}{i2m} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right)}_{j(x, t) \text{ Wahrscheinlichkeitsstromdichte}} &= 0\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \varrho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0$$

Kontinuitätsgleichung

In drei Dimensionen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, t) &= 0 \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{i2m} \left(\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right)\end{aligned}$$

3.3.1 Physikalische Bedeutung

Eindimensional:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} j(x, t)$$

Interpretation:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \varrho(x, t) dx = - \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) dx = j(a, t) - j(b, t)$$

(Abb Q11)

In drei Dimensionen

$$\frac{\partial \varrho(\vec{r}, t)}{\partial t} = - \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \varrho(\vec{r}, t) d^3r = - \int_V \operatorname{div} j(\vec{r}, t) d^3r = - \oint_{\text{OF um } V} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{f}$$

(Abb Q12)

3.4 Stationäre Schrödingergleichung

Sei \hat{H} zeitunabhängig (also $V(\vec{r})$ hängt nicht von t ab)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

Separationsansatz:

$$\psi(\vec{r}, t) = f(t) \varphi(\vec{r})$$

\Rightarrow

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} f(t) \right) \varphi(\vec{r}) = f(t) \hat{H} \varphi(\vec{r}) \quad | : f(t) \varphi(\vec{r})$$

Sei $f(t) \neq 0, \varphi(\vec{r}) \neq 0$

$$\frac{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H} \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}$$

Soll für alle t, \vec{r} gelten \Rightarrow

$$\frac{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)}{f(t)} = \underbrace{E}_{\text{Konstante mit Dimension Energie}} = \frac{\hat{H} \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}$$

\Rightarrow

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E f(t) \tag{9}$$

$$\hat{H} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \tag{10}$$

Stationäre Schrödingergleichung

gilt auch falls $f(t) = 0$ bzw. $\varphi(\vec{r}) = 0$

(9) ist direkt lösbar:

$$f(t) = e^{\frac{E}{i\hbar} t} (\cdot \text{Konstante}) \tag{11}$$

\Rightarrow

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{E}{i\hbar} t} \cdot \varphi(\vec{r})$$

3.4.1 Hinweis

Häufig wird die Wellenfunktion $\varphi(\vec{r})$ auch mit $\psi(\vec{r})$ bezeichnet

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

Im allgemeinen Fall ergibt sich die Lösung von $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$ aus einer Überlagerung von Lösungen des „Types (11)“

3.4.2 Stationäre Schrödingergleichungen

$$\hat{H}\varphi_n(\vec{r}) = \underbrace{E_n}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{\varphi_n(\vec{r})}_{\text{Eigenfunktion}}$$

Eigenwertgleichung

n : Index, der die verschiedenen Lösungen der Gleichung „abzählt“

n wird als Quantenzahl bezeichnet

3.4.3 Beispiel Freies Teilchen

1. Eindimensional: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$\begin{aligned}\hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \Rightarrow \varphi(x) &= Ae^{ikx} \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi(x) &= E\varphi(x) \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2\end{aligned}$$

\rightarrow Quantenzahl $\hat{=} k$

$$\begin{aligned}E_k &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \\ \varphi_k(x) &= Ae^{ikx}\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= e^{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} t \frac{1}{i\hbar}} \cdot Ae^{ikx} \\ &= Ae^{ikx} e^{-i \underbrace{\frac{\hbar k^2}{2m}}_{=\omega} t} \\ &= Ae^{i(kx - \omega t)}\end{aligned}$$

2. Dreidimensional $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= Ae^{i\vec{k}\vec{r}} \\ E_{\vec{k}} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ k^2 &= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\end{aligned}$$

Quantenzahlen $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$

Falls Eigenwerte $E_m = E_{m'}$ übereinstimmen, aber die zugehörigen Eigenfunktionen $\varphi_m(\vec{r})$ und $\varphi_{m'}(\vec{r})$ unterschiedlich sind, so liegt eine „Entartung“ vor

$$E_m = E_{m'} \quad , \quad \varphi_m(\vec{r}) \neq \varphi_{m'}(\vec{r})$$

3.5 Potentialtopf mit unendlich hoher Wahrscheinlichkeit

Eindimensionales System $\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$

(Abb Q13)

$V_0 \rightarrow \infty$: Das Teilchen hält sich nur im Bereich II auf

$$\Rightarrow \varphi^{\text{I}}(x) = 0, \varphi^{\text{III}}(x) = 0$$

3.5.1 Forderung an Wellenfunktion

- $\varphi(x)$ stetig (damit $\varphi'(x)$ definiert)
- $\varphi'(x)$ stetig (damit $\varphi''(x)$ definiert)

Gilt dies auch bei Unstetigkeitsstellen des Potentials?

- $\varphi(x)$ stetig
- $\varphi'(x)$ stetig bei endlichen Sprüngen von $V(x)$

Stetigkeit

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\varphi^{\text{II}}(0) &= \varphi^{\text{I}}(0) = 0 \\ \varphi^{\text{II}}(L) &= \varphi^{\text{III}}(L) = 0\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\varphi^{\text{II}}(0) = \varphi^{\text{II}}(L)$$

Schrödingergleichung im Bereich II

$$V(x) = 0 \Rightarrow \hat{H}^{\text{II}} = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$\hat{H}^{\text{II}}\varphi^{\text{II}}(x) = E\varphi^{\text{II}}(x)$$

$$\Rightarrow \text{Lösungen } \varphi(x) \sim e^{ikx} \text{ oder } e^{-ikx}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\varphi^{\text{II}}(x) &= ae^{ikx} + be^{-ikx} \\ \varphi^{\text{II}}(0) &= a \cdot 1 + b \cdot 1 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow a = -b\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\varphi^{\text{II}}(x) &= a(e^{ikx} - e^{-ikx}) \\ \varphi^{\text{II}}(x) &= 2ai \sin kx\end{aligned}$$

$$x = L$$

$$\varphi^{\text{II}}(L) = 2ai \sin(kL) \stackrel{!}{=} 0$$

\Rightarrow

$$kL = n\pi$$

\Rightarrow

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

\Rightarrow

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} \cdot n^2$$

$$E_n \sim n^2, n = 1, 2, 3, \dots$$

Erinnerung

(Abb Q13)

$$\varphi^{\text{I}}(x) = 0 = \varphi^{\text{III}}(x)$$

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$\varphi^{\text{II}}(0) = 0 = \varphi^{\text{II}}(L); \text{ im Bereich II: } V(x) = 0$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \varphi(x) = e^{ikx} \text{ bzw. } \varphi(x) = e^{-ikx}$$

Linearkombinationen der Lösung \rightarrow erfüllen der Randbedingungen

$$\varphi(x) = ae^{ikx} + b^{-ikx}$$

$$\text{Rand: } \varphi(0) = a + b \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow a = -b \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= a(e^{ikx} - e^{-ikx}) \\ &= 2ai \sin(kx) \end{aligned}$$

$$\text{Rand: } \varphi(L) = 2ai \sin(kL) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} kL &= n\pi \quad n: \text{ganze Zahl} \\ k &= \frac{n\pi}{L} \end{aligned}$$

\Rightarrow Im gesamten Gebiet:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 2ai \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Normierung: $A = 2ai$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \int_0^L \left| A \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) \right|^2 dx &\stackrel{!}{=} 1 \\ |A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi}{L}nx\right) dx &\stackrel{!}{=} 1 \\ |A|^2 \left(\frac{L}{2} - 0\right) &\stackrel{!}{=} 1 \end{aligned}$$

$$\text{da } \int \sin^2(\alpha x) dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4\alpha} \sin(2\alpha x)$$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \underbrace{\text{Phasenfaktor}}_{=e^{i\vartheta}, \vartheta \text{ reel}}$$

Typischerweise wählt man als Phasenfaktor den Wert „Eins“

$$\varphi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) & 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$n = 0$ ausgeschlossen, da $\varphi_0(x) = 0 \hat{=}$ physikalisch nicht sinnvoll

$n = -1, -2, \dots$: $\sin\left(\frac{\pi}{L}(-n)x\right) = -\sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right)$, $\varphi_{-n}(x) = -\varphi_n(x)$. d.h. $\varphi_{-n}(x)$ und $\varphi_n(x)$ stimmen bis auf Phasenfaktor überein

$$\hat{H}\varphi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_n(x) \stackrel{!}{=} E_n \varphi_n$$

Bereich II:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{\pi}{L} n\right)^2 (-) \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \\ &\stackrel{!}{=} E_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2$$

3.5.2 Grafische Darstellung der Resultate

(Abb Q14)

Oft findet man folgende Darstellung:

(Abb Q15)

3.5.3 Physikalische Aspekte

- Eigenzustände können (im Potentialtopf) nur bestimmte Energien haben (diskretes Energiespektrum)
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist räumlich nicht konstant
- In allen Zuständen φ_n ist das Teilchen mit der größten Wahrscheinlichkeit in der Mitte des Topfes ($x = \frac{L}{2}$) zu finden: $\langle x \rangle = \frac{L}{2}$
- Erwartungswert des Impulses: $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$

3.5.4 Formale Aspekte

1. Orthogonalität Skalarprodukt zwischen Funktionen $\varphi(x)$ und $\chi(x)$

$$(\chi, \varphi) := \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \varphi(x) dx$$

(Analog zu $\vec{b} \cdot \vec{a} = \sum_{j=1}^n b_j^* a_j$ mit $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots)$, $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots)$)

$$(\chi, \varphi) = 0 \Rightarrow \text{Funktionen sind „orthogonal“}$$

Hier:

$$\begin{aligned} (\varphi_n, \varphi_{n'}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx \\ &= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n' x\right) dx \\ &= \delta_{n,n'} \text{ (analog zu Fourierreihen)} \end{aligned}$$

\Rightarrow Eigenfunktionen sind orthogonal

2. Vollständigkeit Jede Funktion $f(x)$ mit $f(0) = 0$ und $f(L) = 0$ kann durch die $\varphi_n(x)$ dargestellt werden

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)$$

c_n : Entwicklungskoeffizient (analog zu Fourierdarstellung)

3.5.5 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für Potentiale

Bisher:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x) \quad \text{mit } \hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n \\ &\quad \text{stationäre Zustände} \\ \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 &= \underbrace{e^{-\frac{E_n t}{i\hbar}} e^{\frac{E_n t}{i\hbar}}}_{=1} \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) \\ &= |\varphi_n(x)|^2 \quad \text{unabhängig von } t \end{aligned}$$

Allgemein

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$$

erfüllt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$$

3.5.6 Beispiel

Wellenpaket

(Abb Q16)

Teilchen ist bei $x = \frac{L}{2}$ lokalisiert

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} b^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{(x - \frac{L}{2})^2}{2b^2}} e^{ik_0(x - \frac{L}{2})}$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \psi(x, t) dx &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \varphi_n(x) dx}_{=\delta_{n,n'}} \\ &= c_{n'} e^{\frac{E_{n'} t}{i\hbar}} \end{aligned}$$

$t = 0$:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \psi(x, 0) dx$$

Mit: $\sin \beta x = \frac{1}{2i} (e^{i\beta x} - e^{-i\beta x})$ und $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} e^{i\beta x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}$ für reelle $\alpha > 0$

Dann gilt:

$$c_n = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \sqrt{b} \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{L}} \sqrt{2\pi} \left(e^{ik_0 \frac{L}{2}} e^{-(k_0 + k_n)^2 \frac{b^2}{2}} + e^{-ik_0 \frac{L}{2}} e^{-(-k_0 + k_n)^2 \frac{b^2}{2}} \right)$$

mit $k_n = \frac{n\pi}{L}$

Insgesamt:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \cdot e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 t}$$

(Folie $|\psi(x, t)|^2$ für Teilchen im Potentialtopf)

Klassisch:

(Abb Q17)

3.6 Dreidimensionale Separable Potentiale

Schrödinger-Gleichung $\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$

Separables Potential: $V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \left(\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right)}_{\hat{H}_1(x)} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right)}_{\hat{H}_2(y)} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right)}_{\hat{H}_3(z)} \right) \varphi(\vec{r}) &= E \varphi(\vec{r}) \\ \left(\hat{H}_1(x) + \hat{H}_2(y) + \hat{H}_3(z) \right) &= E \varphi(\vec{r}) \end{aligned}$$

\Rightarrow Separationsansatz: $\varphi(\vec{r}) = f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$

Einsetzen

$$\begin{aligned} \left(\hat{H}_1(x) f(x) \right) g(y) h(z) + \left(\hat{H}_2(y) g(y) \right) f(x) h(z) + \left(\hat{H}_3(z) h(z) \right) f(x) g(y) &= E f(x) g(y) h(z) \quad | : f(x) g(y) h(z) \\ \frac{\hat{H}_1(x) f(x)}{f(x)} + \frac{\hat{H}_2(y) g(y)}{g(y)} + \frac{\hat{H}_3(z) h(z)}{h(z)} &= E \end{aligned}$$

Soll für alle x, y, z gelten \Rightarrow Terme sind alle konstant

$$E^{(x)} + E^{(y)} + E^{(z)} = E$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(x) f_{n_x}(x) &= E^{(x)} f_{n_x}(x) \\ \hat{H}_2(y) g_{n_y}(y) &= E^{(y)} g_{n_y}(y) \\ \hat{H}_3(z) h_{n_z}(z) &= E^{(z)} h_{n_z}(z) \end{aligned}$$

n_x, n_y, n_z : Quantenzahlen

Eigenzustände von $\hat{H}(\vec{r})$ haben die Form

$$\varphi_{n_x, n_y, n_z}(\vec{r}) = f_{n_x}(x) g_{n_y}(y) h_{n_z}(z)$$

Energien:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n_x}^{(x)} + E_{n_y}^{(y)} + E_{n_z}^{(z)}$$

Dann ist es notwendig drei eindimensionale Schrödinger-Gleichungen zu lösen.

3.6.1 Beispiel: Potentialrinne

(Abb Q18)

$V_0 \rightarrow \infty$

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ V_0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\hat{=}$

- Teilchen ist in x -Richtung im Topf von 0 bis L eingesperrt
- Freies Teilchen in y - und z -Richtung

x -Richtung

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x) \\ V_1(x) &= \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ V_0 & \text{sonst} \end{cases} \\ f(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} x n_x\right) \\ E_{n_x}^{(x)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n_x^2 \end{aligned}$$

y-Richtung

$$\begin{aligned} V_2(y) &= 0 \\ \hat{H}_2(y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\ g_{k_y}(y) &= N_y e^{ik_y y} \\ E_{k_y}^{(y)} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 \end{aligned}$$

Quantenzahl $-\infty \leq k_y \leq \infty$

N_y : Normierungsfaktor

z-Richtung analog

$$\begin{aligned} h_{k_z}(z) &= N_z e^{ik_z z} \\ E_{k_z}^{(z)} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} \varphi_{n_x, k_y, k_z}(\vec{r}) &= N \sin\left(\frac{\pi}{L} x n_x\right) e^{ik_y y} e^{ik_z z} \\ E_{n_x, k_y, k_z} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 n_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \right) \end{aligned}$$

N : Normierungsfaktor

$n_x = 1, 2, 3, \dots, -\infty \leq k_y \leq \infty, -\infty \leq k_z \leq \infty$

Ein solches Potential tritt näherungsweise bei Halbleiterquantenstrukturen auf

(Abb Q19)

3.7 Hermitesche Operatoren

Skalarprodukt zwischen $\chi(\vec{r})$ und $\hat{O}\varphi(\vec{r})$

\hat{O} : Operator

$$\left(\chi(\vec{r}), \hat{O}\varphi(\vec{r}) \right) \equiv \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O}\varphi(\vec{r}) d^3r$$

$\chi(\vec{r}), \varphi(\vec{r})$: differenzierbar und quadratintegrabel (oder periodisch)

3.7.1 Adjungierter Operator \hat{O}^+

$$\int_{\mathbb{R}^3} \chi^*(\vec{r}) \hat{O}\varphi(\vec{r}) d^3r \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{O}^+ \chi(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) d^3r$$

\hat{O}^+ ist der zu \hat{O} adjungierte Operator

Also

$$\left(\chi, \hat{O}\varphi \right) = \left(\hat{O}^+ \chi, \varphi \right)$$

Beispiel $\hat{O} = \frac{d}{dx}$ (eindimensional)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \hat{O} \varphi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\chi^*(x)}_u \underbrace{\frac{d}{dx} \varphi(x)}_{v'} dx \\ \text{partielle Integration} &= \underbrace{\left[\underbrace{\chi^*(x)}_u \underbrace{\varphi(x)}_v \right]_{-\infty}^{\infty}}_0 - \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\frac{d}{dx} \chi^*(x) \right)}_{u'} \underbrace{\varphi(x)}_v dx \end{aligned}$$

$\chi^*(\infty) = \chi^*(-\infty) = 0$, $\varphi(\infty) = \varphi(-\infty) = 0$, da χ, φ quadratintegrabel

\Rightarrow

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{d}{dx} \chi^*(x) \right) \varphi(x) dx$$

Also

$$\hat{O}^+ = -\frac{d}{dx}$$

3.7.2 Speziell

$$\hat{O} = \hat{O}^+$$

Selbstadjungierter Operator (hermitescher Operator)

Diese Operatoren sind in der Quantenmechanik von besonderer Bedeutung

(Hermitescher Operator: Definitionsbereich von \hat{O} und \hat{O}^+ können unterschiedlich sein)

Beispiele

1. Ortsoperator \hat{r}

$$\int \chi^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi(\vec{r}) d^3r = \int (\vec{r} \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r$$

$$\Rightarrow \hat{r}^+ = \hat{r} \text{ (hermitescher Operator)}$$

2. Impulsoperator

eindimensional: $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{\hat{p}_x} \varphi(x) dx &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{d}{dx} \chi(x) \right)^* \varphi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{\hat{p}_x^+} \chi(x) \right)^* \varphi(x) dx \end{aligned}$$

$\hat{p}_x^+ = \hat{p}_x \Rightarrow \hat{p}_x$ ist ein hermitescher Operator

Analog $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ ist ebenfalls hermitesch

3. Aus \hat{O} hermitesch folgt \hat{O}^2 ist ebenfalls hermitesch:

$$\begin{aligned}
 \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O}^2 \varphi(\vec{r}) d^3r &= \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O} (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^+ \chi(\vec{r}))^* (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O} \chi(\vec{r}))^* (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^+ \hat{O} \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^2 \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\hat{O}^2)^+ = \hat{O}^2$$

$\Rightarrow \hat{p}^2$ ist hermitesch (da \hat{p} hermitesch ist)

$V(\vec{r})$ ist auch hermitesch $\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ ist ein hermitescher Operator

3.7.3 Eigenschaften hermitescher Operatoren

Erwartungswerte

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{O} \rangle &= \int \varphi^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &\stackrel{\text{da } \hat{O}^+ = \hat{O}}{=} \int (\hat{O} \varphi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &= \int \varphi(\vec{r}) (\hat{O} \varphi(\vec{r}))^* d^3r \\
 &= \left(\int \varphi^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi(\vec{r}) d^3r \right)^* \\
 &= (\langle \hat{O} \rangle)^*
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \langle \hat{O} \rangle$ ist reell

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind immer reell

Eigenwerte

$$\begin{aligned}
 \hat{O} \varphi_n(\vec{r}) &= \lambda_n \varphi_n(\vec{r}) \\
 \underbrace{\int \varphi_n^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi_n(\vec{r}) d^3r}_{\text{reell}} &= \lambda_n \underbrace{\int \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) d^3r}_{\underbrace{\int |\varphi_n(\vec{r})|^2 d^3r}_{\text{reell}}}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \lambda_n$ reell

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind immer reell

Orthogonalität der Eigenfunktionen

$$\begin{aligned}
 \hat{O} \varphi_1(\vec{r}) &= \lambda_1 \varphi_1(\vec{r}) \\
 \hat{O} \varphi_2(\vec{r}) &= \lambda_2 \varphi_2(\vec{r}) \\
 \varphi_1(\vec{r}) &\neq \varphi_2(\vec{r})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I &= \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{O}\varphi_1(\vec{r})}_{\lambda_1 \varphi_1(\vec{r})} d^3r = \lambda_1 \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r \\
&= \int \left(\underbrace{\hat{O}\varphi_2(\vec{r})}_{\lambda_2 \varphi_2(\vec{r})} \right)^* \varphi_1(\vec{r}) d^3r = \underbrace{\lambda_2^*}_{=\lambda_2} \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r
\end{aligned}$$

Fallunterscheidung

1. $\lambda_1 \neq \lambda_2$ also keine Entartung
 $\Rightarrow \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r = 0$
d.h. φ_1 und φ_2 sind „Orthogonal“
allg. $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$

$$\int \tilde{\varphi}_{n'}^* \varphi_n(\vec{r}) d^3r = \delta_{n,n'}$$

2. $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$ „Entartung“
 $\Rightarrow \chi = c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})$ ist Eigenfunktion
 $\hat{O}\chi = c_1 \hat{O}\varphi_1(\vec{r}) + c_2 \hat{O}\varphi_2(\vec{r}) = \lambda (c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})) = \lambda \chi(\vec{r})$
Wähle dabei:

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_1(\vec{r}) &= \varphi_1(\vec{r}) \\
\tilde{\varphi}_2(\vec{r}) &= \left(\varphi_2(\vec{r}) - \varphi(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r \right) \cdot \underbrace{N_2}_{\text{Normierungsfaktor}}
\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}
\int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \tilde{\varphi}_2(\vec{r}) d^3r &= \left(\int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r - \underbrace{\int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r}_{=1, \text{ da } \varphi_1 \text{ normiert}} \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r \right) N_2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

Analog bei drei entarteten Eigenwerten $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 \equiv \lambda$

$$\tilde{\varphi}_3 = N_3 \left(\varphi_3(\vec{r}) - \tilde{\varphi}_2(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_3(\vec{r}) d^3r - \tilde{\varphi}_1(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_3(\vec{r}) d^3r \right)$$

\Rightarrow

Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind orthogonal zueinander (wählbar)

$\hat{=}$

$$\int \tilde{\varphi}_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) d^3r = \delta_{n,n'}$$

Orthogonalsystem von Eigenfunktionen

Beispiele

- Teilchen im Potentialtopf: Quantenzahl $n \hat{=}$ ganze Zahl (diskretes Spektrum)
- Freie Teilchen: Quantenzahl $k \hat{=}$ reelle Zahl (kontinuierliches Spektrum)

z.B. in einer Dimension

$$\begin{aligned}\varphi_k(x) &= N e^{ikx} \\ \varphi_{k'}(x) &= N e^{ik'x}\end{aligned}$$

Es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ik'x} dx = 2\pi \delta(k - k')$$

Wähle $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow$

$$\int \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) dx = \delta(k - k')$$

„Normierung auf δ -Funktion“

Analog in drei Dimensionen:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

\Rightarrow

$$\int \varphi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}'}(\vec{r}) d^3r = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$$

3.8 Vollständiges Orthogonalsystem (VONS)

$f(\vec{r})$ Funktion, die mit Randbedingungen verträglich ist

$f(\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$ ist beliebig genau darstellbar bzw. $f(\vec{r}) = \int c_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3k$

Typischerweise sind Funktionensysteme der in der Quantenmechanik auftretenden hermiteschen Operatoren vollständig.

3.9 Postulate der Quantenmechanik

1. Für jedes physikalische System existiert eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$. $\psi(\vec{r}, t)$ beschreibt den „Zustand“ des Systems. In $\psi(\vec{r}, t)$ steckt unsere gesamte Information über das System.
2. Physikalisch beobachtbare Größen (Observable) werden durch hermitesche Operatoren dargestellt.
3. Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

beschrieben.

Der Hamiltonoperator \hat{H} ergibt sich aus der Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik durch Ersetzen der Observablen durch hermitesche Operatoren.

4 Anwendungen der Quantenmechanik in einer Dimension

4.1 Stetigkeit der Wellenfunktion

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x)}_{\varphi''(x)} + V(x) \varphi(x) \right) = E \varphi(x)$$

Was gilt für die Stetigkeit von $\varphi(x)$ und $\varphi'(x)$, wenn $V(x)$ unstetig ist?

(Abb Q 20)

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

Falls $\varphi(x)$ bei x_0 einen Sprung hätte:

$$\varphi(x) = \underbrace{\tilde{\varphi}(x)}_{\text{stetiger Teil}} + \underbrace{A}_{\text{Höhe des Sprungs}} \theta(x - x_0)$$

\Rightarrow

$$\varphi'(x) = \tilde{\varphi}'(x) + A \delta(x - x_0)$$

\Rightarrow

$$\varphi''(x) = \tilde{\varphi}''(x) + A \delta'(x - x_0)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \int f(x) \delta(x - x_0) dx &= f(x_0) \\ \int f(x) \delta'(x - x_0) dx &= -f'(x_0) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \varphi''(x) &= \tilde{\varphi}''(x) = A \underbrace{\delta'(x - x_0)}_{\text{tritt auf der rechten Seite nicht auf}} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left(\underbrace{V(x)}_{\text{Sprung bei } x_0} - E \right) \left(\underbrace{\tilde{\varphi}(x)}_{\text{stetig}} + A \theta(x - x_0) \right) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$A = 0 \Rightarrow \varphi(x) \text{ ist stetig!}$$

Was lässt sich über $\varphi'(x)$ aussagen?

Dann

$$\begin{aligned} \int_{x_0-d}^{x_0+d} \underbrace{\varphi''(x)}_{\frac{d}{dx} \varphi'(x)} dx &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-d}^{x_0+d} (V(x) - E) dx \\ &= \varphi'(x_0 + d) - \varphi'(x_0 - d) \end{aligned}$$

Endlicher Sprung in $V(x) \Rightarrow$ endlicher Wert des Integrals

$$\lim_{d \rightarrow 0} (\varphi'(x_0 + d) - \varphi'(x_0 - d)) = 0$$

$\Rightarrow \varphi'(x)$ ist bei x_0 stetig

Falls $V(x)$ unendlich groß wird, ist keine Aussage möglich.

Bei Potentialen mit endlich großen Sprungstellen sind $\varphi(x)$ und $\varphi'(x)$ stetig.

4.2 Gebundene Zustände beim Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

(Abb Q21)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x \leq -a \\ -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

Betrachte hier nur Lösungen mit $-V_0 \leq E \leq 0$

4.2.1 Lösungen in den Bereichen I, II, III

Bereich I: $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Ansatz: $\varphi = e^{\pm i k x} \Rightarrow$

$$+\frac{\hbar^2}{2m} k^2 \varphi(x) = E \varphi(x) \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Da $E \leq 0 \Rightarrow k$ ist imaginär

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = i \underbrace{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)}}_{:=\kappa}$$
$$k = i\kappa$$

\Rightarrow

$$\varphi^{(I)}(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$$

mit $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)}$

Da $e^{-\kappa x}$ für $x \rightarrow -\infty$ divergiert, ist aus physikalischen Gründen (Normierbarkeit) $B = 0$ zu wählen

$$\varphi^I(x) = A e^{+\kappa x}$$

Bereich II: $V(x) = -V_0$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \right) \varphi(x) &= E \varphi(x) \\ -\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) \varphi(x) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= e^{\pm i k x} \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(V_0 + E)}_{\geq 0} \end{aligned}$$

$$\varphi^{\text{II}}(x) = \tilde{C} e^{i k x} + \tilde{D} e^{-i k x}$$

oder

$$\varphi^{\text{II}}(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx)$$

(ist in diesem Fall günstiger, da $\varphi^{\text{II}}(x)$ reell)

Bereich III: Analog zu I

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{III}}(x) &= F e^{\kappa x} + G^{-\kappa x} \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)} \\ F &= 0, \text{ da } e^{\kappa x} \rightarrow \infty \text{ für } x \rightarrow \infty \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{I}}(x) &= A e^{\kappa x} \\ \varphi^{\text{II}}(x) &= C \cos(kx) + D \sin(kx) \\ \varphi^{\text{III}}(x) &= G e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{I}'}(x) &= \kappa A e^{\kappa x} \\ \varphi^{\text{II}'}(x) &= -k C \sin(kx) + k D \cos(kx) \\ \varphi^{\text{III}'}(x) &= -\kappa G e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Anpassung von $\varphi(x)$, $\varphi'(x)$ bei $x = -a$ und $x = a$

$$1. \quad \varphi^{\text{I}}(-a) = \varphi^{\text{II}}(-a)$$

$$\begin{aligned} A e^{-\kappa a} &= C \cos(-ka) + D \sin(-ka) \\ &= C \cos(ka) - D \sin(ka) \end{aligned} \quad (12)$$

$$2. \quad \varphi^{\text{I}'}(-a) = \varphi^{\text{II}'}(-a)$$

$$\begin{aligned} \kappa A e^{-\kappa a} &= -k C \sin(-ka) + k D \cos(-ka) \\ &= k C \sin(ka) + k D \cos(ka) \end{aligned} \quad (13)$$

$$3. \varphi^{\text{II}}(a) = \varphi^{\text{III}}(a)$$

$$C \cos(ka) + D \sin(ka) = G e^{-\kappa a} \quad (14)$$

$$4. \varphi^{\text{II}'}(a) = \varphi^{\text{III}'}(a)$$

$$-kC \sin(ka) + kD \cos(ka) = -\kappa G e^{-\kappa a} \quad (15)$$

+ Normierung $\hat{=}$ 5 Gleichungen für 4 Unbekannte A, C, D, G

$$(12) + (14)$$

$$(A + G) e^{-\kappa a} = 2C \cos(ka) \quad (16)$$

$$(12) - (14)$$

$$(A - G) e^{-\kappa a} = -2D \sin(ka) \quad (17)$$

$$(13) + (15)$$

$$\kappa(A - G) e^{-\kappa a} = 2Dk \cos(ka) \quad (18)$$

$$(13) - (15)$$

$$\kappa(A + G) e^{-\kappa a} = 2Ck \sin(ka) \quad (19)$$

$$(16), (19)$$

$$\kappa 2C \cos(ka) = 2Ck \sin(ka) \quad (20)$$

\Rightarrow

$$\frac{\kappa}{k} = \tan(ka)$$

$$(17), (18)$$

$$-\kappa 2D \sin(ka) = 2Dk \cos(ka) \quad (21)$$

$$-\frac{\kappa}{k} = \cot(ka)$$

Also: wir erhalten Lösungen des Gleichungssystems

$$1. \text{ wenn } \boxed{\frac{\kappa}{k} = \tan(ka)} \Rightarrow (21) \text{ ist nur erfüllbar für } D = 0 \stackrel{(17)}{\Rightarrow} A = G \stackrel{(16)}{\Rightarrow} 2A \cdot e^{-\kappa a} = 2G \cos(ka)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & -\infty \leq x \leq -a \\ A \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)} & -a \leq x \leq a \\ Ae^{-\kappa x} & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$\hat{=}$ gerade Funktion

$$2. \text{ wenn } \boxed{-\frac{\kappa}{k} = \cot(ka)} \stackrel{(20)}{\Rightarrow} C = 0 \stackrel{(16)}{\Rightarrow} G = -A \stackrel{(18)}{\Rightarrow} 2A\kappa e^{-\kappa a} = 2Dk \cos(ka)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x} & -\infty \leq x \leq -a \\ A \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)} \sin(kx) = -A \frac{e^{-\kappa a}}{\sin(ka)} \sin(kx) & -a \leq x \leq a \\ -Ae^{-\kappa x} & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$\hat{=}$ ungerade Funktion

4.2.2 Auswertung der Lösungsbedingung

$$\begin{aligned}\kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} |E| &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2 \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - \kappa^2\end{aligned}$$

Gerade Zustände

$$\begin{aligned}\tan(ka) &= \frac{\kappa}{k} = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2} \cdot a}{k \cdot a} \\ ka \tan(ka) &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - (ka)^2}\end{aligned}$$

$$y := ka, \quad R^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \Rightarrow$$

$$y \tan y = \sqrt{R^2 - y^2} \quad \leftarrow \text{Kreis}$$

(Abb Q22)

Je nach Größe von V_0 (und damit von R) gibt es eine oder mehrere Lösungen k_n

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E_n|)$$

$$|E_n| = V_0 - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Energie der Zustände mit gerader Wellenfunktion

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Ungerade Zustände

$$\kappa = -k \cot(ka)$$

\Rightarrow

$$-y \cdot \cot(y) = \sqrt{R^2 - y^2}$$

Es gibt nicht für alle Werte von V_0 eine Lösung.

Nur Lösung für

$$V_0 \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

(Abb Q23)

- Zustände mit gerader und ungerader Symmetrie wechseln sich ab
- Abstand zwischen den k_n ist nahezu konstant
 \Rightarrow Abstände zwischen den Energien E_n ist nahezu quadratisch bezüglich n

Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ Schnittpunkte von $y \cdot \tan y$ (bzw. $-y \cdot \cot y$) liegen bei $y_n = n \frac{\pi}{2}$ $n = 1, 2, 3, \dots$

\Rightarrow

$$k_n = \frac{y_n}{a} = \frac{\pi}{2a} n \quad (L = 2a \hat{=} \text{Breite des Topfes})$$

Abstände der Energien vom Topfboden:

$$\Delta E_n = E_n + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \cdot n \right)^2$$

Vergleiche mit Kapitel 3.5 auf Seite 19

4.2.3 Wellenfunktion im endlich hohen Topf

(Abb Q24)

4.3 Harmonischer Oszillator

(Abb Q25)

$$\frac{1}{2}kx^2 = V(x)$$

Klassisches System

z.B. Federpendel

(Abb Q26)

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow F(x) = -kx$$

Newton:

$$m\dot{x} = F(x) = -kx$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} x(t) &= A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \\ \omega &= \sqrt{\frac{k}{m}} \end{aligned}$$

Energie

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) + \frac{1}{2}kx^2(t) \\ E &= \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 + B^2) \end{aligned}$$

Quantenmechanische Systeme

- Schwingungen von Atomen in Molekülen und Festkörpern
Beispiel: H₂ Molekül (Abb Q27)
Potential zwischen Atomen:
(Abb Q28)
Harmonischer Oszillator ist sehr gute Näherung bei Schwingungen mit kleiner Auslenkung
- Photonen (Lichtquanten) verhalten sich wie quantenmechanische Oszillatoren

4.3.1 Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \end{aligned}$$

Lösung durch

- Potenzreihenansatz
- „algebraische“ Methode (Später)

1. Schritt: Transformation auf dimensionslose Koordinaten Idee: Substitution $y = \alpha \cdot x$ so, dass $\frac{d^2}{dy^2}$ und y^2 gleiche Vorfaktoren haben

$$\Rightarrow x = \frac{1}{\alpha} y \rightarrow x^2 = \frac{1}{\alpha^2} y^2$$

$$\frac{d}{dx} = \alpha \frac{d}{dy}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \frac{d^2}{dy^2}$$

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \alpha^2 \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} k \frac{1}{\alpha^2} y^2$$

$$\frac{\alpha^2 \hbar^2}{m} = \frac{k}{\alpha^2} \Rightarrow \alpha^4 = \frac{km}{\hbar^2}$$

$$\text{Abkürzung: } \omega := \sqrt{\frac{k}{m}} \alpha^4 = \frac{1}{\hbar^2} m^2 \omega^2$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \\ \hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \varphi(x) &= \varphi\left(\frac{y}{\alpha}\right) := \phi(y) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \phi(y) = E\phi(y)$$

\Rightarrow

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \phi(y) = \lambda \phi(y)$$

$$\lambda = \frac{E \cdot 2}{\hbar\omega}$$

2. Schritt: Ansatz für $\phi(y)$

Zunächst Analyse für $y \rightarrow \pm\infty$ Sei $|y| \gg |\lambda|$:

$$\text{Näherungsweise: } \left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 \right) \phi(y) = 0$$

Ansatz:

$$\begin{aligned} \phi(y) &= e^{-\beta y^2} \\ \phi'(y) &= -\beta 2y e^{-\beta y^2} \\ \phi''(y) &= -\beta 2 e^{-\beta y^2} + \beta^2 4y^2 e^{-\beta y^2} \end{aligned}$$

Mit $\beta = \frac{1}{2}$ folgt:

$$\phi''(y) = (-1 + y^2) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$y \rightarrow \pm\infty$: (-1) kann vernachlässigt werden

$\Rightarrow \phi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$ löst Differentialgleichung für $y \rightarrow \pm\infty$

\Rightarrow Ansatz für alle y :

$$\phi(y) = \underbrace{f(y)}_{\text{gesuchte Funktion}} e^{-\frac{y^2}{2}}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}\phi'(y) &= f'(y) e^{-\frac{y^2}{2}} + f(y) \left(-\frac{2y}{2}\right) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ \phi''(y) &= (f''(y) - f(y) - yf'(y)) e^{-\frac{y^2}{2}} + \left(-\frac{2y}{2}\right) (f'(y) - yf(y)) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ &= (f''(y) - 2yf'(y) + (y^2 - 1)f(y)) e^{-\frac{y^2}{2}}\end{aligned}$$

Somit wird aus

$$\phi''(y) + (\lambda - y^2)\phi(y) = 0$$

folgende Differentialgleichung für $f(y)$

$$f''(y) - 2yf'(y) + (\lambda - 1)f(y) = 0$$

Hermiteische Differentialgleichung nach C. Hermite (1822 - 1901)

Einfache Ansätze

1. $f(y) = c$ (Konstante)
 $f'' = f' = 0 \Rightarrow (\lambda - 1)c = 0$
 \Rightarrow Eigenwert $\lambda = 1$, $f = \text{const}$
2. $f(y) = a \cdot y$, $f'(y) = a$, $f''(y) = 0$
 $0 - 2y \cdot a + (\lambda - 1)ay = 0$
 $(\lambda - 3)ay = 0$
 \Rightarrow Eigenwert $\lambda = 3$, $f(y) = ay$
3. $f(y) = by^2$ keine Lösung, aber $f(y) = by^2 + ay + c$ ist Lösung

3. Schritt Lösung der Differentialgleichung durch Potenzreihenansatz Idee: Setze

$$f(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j y^j$$

Dazu:

$$\begin{aligned}f'(y) &= \sum_{j=0}^{\infty} A_j j y^{j-1} \\ f''(y) &= \sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}\end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}}_{f''(y)} - \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} 2A_j j y^j}_{2yf'(y)} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} A_j (\lambda - 1) y^j}_{(\lambda-1)f(y)} = 0$$

Umsummation

$$f''(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}$$

$$l := j-2 \curvearrowright j = l+2$$

$$f''(y) = \sum_{l=0}^{\infty} A_{l+2} (l+2)(l+1) y^l$$

Nenne $l = j$

$$f''(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_{j+2} (j+2)(j+1) y^j$$

$$\Rightarrow f''(y) - 2y f'(y) + (\lambda - 1) f(y) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{(A_{j+2} (j+2)(j+1) + (\lambda - 1 - 2j) A_j)}_{\text{Soll für alle } y \text{ gelten!} \Rightarrow \sim = 0} y^j = 0$$

$$\sim = 0 \Rightarrow$$

$$A_{j+2} = -\frac{\lambda - 1 - 2j}{(j+2)(j+1)} A_j \quad (22)$$

Rekursionsformel für die Koeffizienten

Starte z.B. mit $A_0 \Rightarrow A_2, A_4, A_6, \dots$

oder mit $A_1 \Rightarrow A_3, A_5, A_7, \dots$

Liefert für alle λ Lösungen

Aber $\phi(y) = f(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$ muss normierbar bleiben

Wir überzeugen uns davon, dass $f(y)$ wie e^{y^2} anwächst, falls die Potenzreihe nicht abbricht.

Zwischenrechnung Betrachte „große“ Werte von j

$j \rightarrow \infty$:

$$A_{j+2} = \frac{2j}{j^2} A_j = \frac{2}{j} A_j$$

$$\curvearrowright \left\| \frac{A_{j+2}}{A_j} = \frac{2}{j} \right\|$$

$$e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (y^2)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} y^{2n}$$

$$j = 2n, n = \frac{j}{2}$$

$$e^{y^2} = \sum_{\substack{j=0 \\ \text{mit } j \text{ gerade}}}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} y^j = \sum_{\substack{j=0 \\ \text{alle } j}}^{\infty} B_j y^j$$

$$B_j = \begin{cases} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} & j \text{ gerade} \\ 0 & j \text{ ungerade} \end{cases}$$

$$B_{j+2} = \frac{1}{\left(\frac{j+2}{2}\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)} = B_j \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)}$$

$$\frac{B_{j+2}}{B_j} = \frac{1}{\frac{j}{2}+1} \underset{j \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\frac{j}{2}} = \frac{2}{j} \left(\text{wie } \frac{A_{j+2}}{A_j} \right)$$

\Rightarrow Potenzreihe verhält sich für große y wie e^{y^2} (für ungerade Potenzen Vergleich mit ye^{y^2})

\Rightarrow Potenzreihe muss abbrechen!

Abbrechen bedeutet: Ab einem bestimmten Index n sind alle Koeffizienten mit $j > n$ gleich null.

Also

$A_0, A_2, A_4, \dots, A_n \neq 0$ und $A_{n+2}, A_{n+4}, \dots = 0$ (n gerade)

$A_1, A_3, A_5, \dots, A_n \neq 0$ und $A_{n+2}, A_{n+4}, \dots = 0$ (n ungerade)

Dies tritt nach (22) auf für:

$$(\lambda - 1 - 2n) = 0$$

\Rightarrow

$$\lambda = 2n + 1 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

\Rightarrow

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda = \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1)$$

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

Energieniveaus des harmonischen Oszillators

(Abb Q29)

Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

E_n :

- diskret
- äquidistant

Wellenfunktionen $\phi_n(x) = f_n(x) e^{-\frac{y^2}{2}}$

$$A_{j+2}^{(n)} = \frac{(2j+1-\lambda^{(n)})}{(j+2)(j+1)} A_j^{(n)} = \frac{2j-2n}{(j+2)(j+1)} A_j^{(n)}$$

Gerade Werte von n $n = 0: A_0^{(0)} \neq 0 \Rightarrow A_2^{(0)} = 0$

$$\begin{aligned} f_0(y) &= A_0^{(0)} \\ \lambda^{(0)} &= 1 \end{aligned}$$

$n = 2: (\lambda = 5) A_0^{(2)} \neq 0$

$$\begin{aligned} A_2^{(2)} &= \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot 2}{2 \cdot 1} A_0^{(2)} = -2A_0^{(2)} \\ f_2(y) &= A_0^{(2)} (-2y^2 + 1) \end{aligned}$$

$n = 4: A_0^{(4)} \neq 0$

$$\begin{aligned} A_2^{(4)} &= \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot 4}{2} A_0^{(4)} = -4A_0^{(4)} \\ A_4^{(4)} &= \frac{2 \cdot 2 - 2 \cdot 4}{(2+2)(2+1)} A_2^{(4)} = \frac{-4}{4 \cdot 3} A_2^{(4)} = -\frac{1}{3} A_2^{(4)} \\ &= +\frac{4}{3} A_0^{(4)} \end{aligned}$$

$$f_4(y) = A_0^{(4)} \left(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4 \right)$$

und so weiter.

Ungerade Werte von n

$$\begin{aligned} f_1(y) &= A_1^{(1)} = y \\ f_3(y) &= A_1^{(3)} \left(y - \frac{2}{3}y^3 \right) \\ &\vdots \end{aligned}$$

Konvention Wählt man die $A_0^{(n)}$ bzw. $A_1^{(n)}$ danach, dass vor der höchsten Potenz von y ein Faktor 2^n steht, so bezeichnet man die Lösung als Kermite Polynome.

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Da $\varphi_n(x) = \phi_n(\alpha x)$, $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ und

$$\phi_n(\alpha x) = H_n(\alpha x) e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} \underbrace{N_n}_{\text{Normierungsfaktor}}$$

folgt

$$\varphi_n(x) = N_n H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Eigenzustände des harmonischen Oszillators

mit $N_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$ (hier ohne Rechnung)

Resultate

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2,$$

$$\varphi_n(x) = N_n H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(Folie „Der harmonische Oszillator“)

- n gerade $\rightarrow \varphi_n(x) = \varphi_n(-x)$, n ungerade $\varphi_n(x) = -\varphi_n(-x)$
- $\varphi_n(x)$ besitzt n Knoten
- Abfall von $e^{-\frac{m}{2\hbar}\sqrt{\frac{k}{m}}x^2} = e^{-\frac{\sqrt{m}\sqrt{k}}{2\hbar}x^2}$
Starker Abfall bei:
 - großer Federkonstante k
 - großer Masse

Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte Quantenmechanik:

$$\varrho_{qm}(x) = |\psi_n(x, t)|^2 = |\varphi_n(x)|^2$$

da $\psi_n(x, t) = e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$ stationärer Zustand

Klassisches Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

(Abb Q30)

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \cos(\omega t) \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{N}{|v(x)|} \end{aligned}$$

N : Normierungskonstante $\rightarrow \int \varrho_{kl}(x) dx = 1$

$v(x)$: Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= -x_0 \omega \sin(\omega t) \\ |\dot{x}(t)| &= x_0 \omega \sqrt{1 - \cos^2(\omega t)} \\ &= \omega \sqrt{x_0^2 - x_0^2 \cos^2(\omega t)} \\ &= \omega \sqrt{x_0^2 - x^2} \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{N}{\omega \sqrt{x_0^2 - x^2}}, \text{ Es folgt dann } N = \frac{\omega}{\pi} \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x_0^2 - x^2}} \end{aligned}$$

(Abb Q31)

(Folie „Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte“)

Beispiel klassischer Oszillator mit $m = 0,1\text{kg}$, $\omega = 10\text{Hz}$, $x_0 = 1\text{cm}$

\Rightarrow

$$E = \frac{1}{2} k x_0^2 = \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}^2}$$

quantenmechanischer Oszillator

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = 1,054 \cdot 10^{-34} \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}} \cdot 10 \cdot \frac{1}{\text{s}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

\Rightarrow

$$n + \frac{1}{2} = 4,7 \cdot 10^{29}$$

4.3.2 Eigenschaften der Hermite-Polynome

Hermite-Polynome zählen zu „speziellen Funktionen der mathematischen Physik“

Differentialgleichung

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0$$

$$H_n(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^j n!}{j! (n-2j)!} (2x)^{n-2j} \quad (23)$$

$$\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{n-1}{2} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

(folgt aus Rekursionsformel)

Rodrigues Formel

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Beweis z.B.

- Berechnung $H_n'(x)$, $H_n''(x)$
- Einsetzen in Differentialgleichung
- vollständige Induktion: $n = 0$, Schluss von n auf $n + 1$

Rekursionsformeln

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x)$$

folgt durch Ableitung von (23)

$$2xH_n(x) = H_{n+1}(x) + 2nH_{n-1}(x)$$

folgt aus (25) durch $\frac{d}{dx}$ (24)

\Rightarrow

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

Erzeugende Funktionen

$$\begin{aligned} F(x, s) &= e^{x^2 - (s-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{s^n}{n!} \\ &= \underbrace{1}_{H_0} + \underbrace{2x}_{H_1} s + \underbrace{(4x^2 - 2)}_{H_2} \frac{s^2}{2} + \dots \end{aligned}$$

Orthogonalität (bezüglich e^{-x^2})

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx = \delta_{n,n'}$$

\Rightarrow

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_{n'}(x) e^{-x^2} dx = \delta_{n,n'} 2^n n! \sqrt{\pi}$$

4.3.3 Zeitliches Verhalten des harmonischen Oszillators

Bisher: stationäre Lösung

$$\psi_n(x, t) = e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$$

Jetzt: Überlagerung:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x) \quad (26)$$

Beispiel I: Überlagerung von 3 Zuständen

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} \psi_1(x, t) + \frac{1}{2} \psi_2(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_3(x, t)$$

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{1}{4} \int |\psi_1(x, t)|^2 dx + \frac{1}{4} \int |\psi_2(x, t)|^2 dx + \frac{1}{2} \int |\psi_3(x, t)|^2 dx \\ &\quad + \text{Mischterme, deren Integral verschwindet} \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = 1 \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-\frac{\alpha^2}{2} x^2} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \\ &\quad \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot e^{-i\frac{3}{2}\omega t} \cdot \frac{2\alpha x}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \cdot e^{-i\frac{5}{2}\omega t} \frac{4\alpha^2 x^2 - 2}{\sqrt{8}} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{7}{2}\omega t} \frac{8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x}{\sqrt{48}} \right) \\ \alpha &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \end{aligned}$$

(Folie „Dynamik von Wellenpaketen“ linke Spalte)

$|\psi(x, t)|^2$ oszilliert mit $\cos(\omega t)$ und $\cos(2\omega t)$

$\langle \hat{x} \rangle_t$ oszilliert nur mit $\cos(\omega t)$

Beispiel II: quasi klassischer Zustand Dazu: Wellenpaket $\psi(x, t)$ bei $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\alpha} \left(\frac{1}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2}$$

(1) Berechnung der c_n bei $t = 0$ aus (26)

$$\underbrace{(26)}_{\text{mit } t=0} \int \varphi_n^*(x) dx \Rightarrow \int \varphi_n^* \psi(x, 0) dx = \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\int \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx}_{\delta_{n,n'}}$$

\Rightarrow

$$c_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x, 0) dx$$

Die explizite Rechnung liefert (siehe w. Nolting, Quantenmechanik I, Aufgabe 4.4.17)

$$c_n = \frac{e^{-\frac{\alpha^2}{4} x_0^2}}{\sqrt{n! 2^n}}$$

Einsetzen in (26) liefert

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{4\pi}} e^{-\frac{m\omega}{k} \left(x - x_0 - \underbrace{\cos(\omega t)}_{\text{Oszillation mit } \omega} \right)^2}$$

(Folie „Dynamik von Wellenpaketen“ rechte Spalten)

$\rightarrow \varrho(x, t)$ ist formstabil und oszilliert mit Frequenz ω

\rightarrow quasiklassischer Zustand (Glauber-Zustand) (kohärente Zustände)

$$\langle \hat{x} \rangle_t \sim \cos(\omega t)$$

4.4 Allgemeine Aussagen über das zeitliche Verhalten von Erwartungswerten: die Ehrenfest-Gleichungen

Dann $\langle \hat{O} \rangle_t = \int \psi^*(x, t) \hat{O} \psi(x, t) dx$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle_t &= \int \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} \hat{O} \psi(x, t) dx \\ &+ \int \psi^*(x, t) \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \psi(x, t) dx \quad \left(\text{falls } \hat{O} \text{ von } t \text{ abhängt} \right) \\ &+ \int \psi^*(x, t) \hat{O} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H} \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \hat{H}^* \psi^* = \hat{H} \psi^* \quad \text{für } \hat{H} \text{ reell} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} \int \left(-\hat{H}^* \psi(x, t) \right) \hat{O} \psi(x, t) dx + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^*(x, t) \hat{O} \hat{H} \psi(x, t) dx + \underbrace{\int \psi^*(x, t) \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \psi(x, t) dx}_{\left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t} \\
\frac{d}{dt} \left\langle \hat{O} \right\rangle_t &= \frac{1}{i\hbar} \int \left(\psi^*(x, t) \hat{H} \hat{O} \psi(x, t) - \psi^*(x, t) \hat{O} \hat{H} \psi(x, t) \right) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^*(x, t) \left[\hat{H}, \hat{O} \right] \psi(x, t) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t
\end{aligned}$$

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

Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

Anwendung

$$1. \hat{O} = \hat{x}, \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{x} \right] \right\rangle_t \\
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V(\vec{r}) \\
\left[\hat{H}, \hat{x} \right] &= \underbrace{\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{\substack{\frac{1}{2m} \frac{2\hbar}{i} \hat{p}_x \\ \text{(siehe Übungsaufgabe)}}} + \underbrace{\left[\frac{\hat{p}_y^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{=0} + \underbrace{\left[\frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{=0} + \underbrace{[V(\vec{r}), \hat{x}]}_{=0} \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle_t}{m}
\end{aligned}$$

$$\text{Analog } \frac{d}{dt} \langle \hat{y} \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_y \rangle_t}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{z} \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_z \rangle_t}{m} \Rightarrow$$

$$m \frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{r}} \rangle_t = \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t$$

Klassische Physik:

$$m \frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \vec{p}(t)$$

$$2. \hat{O} = \hat{p}_x, \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] \right\rangle_t$$

Dazu:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] &= \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \hat{p}_x \right] = [V(\vec{r}), \hat{p}_x] \\
[V(\vec{r}), \hat{p}_x] f(\vec{r}) &= \left(V(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) \right) f(\vec{r}) \\
&= V(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) \right) f(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} V(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} f(\vec{r}) \\
\Rightarrow [V(\vec{r}), \hat{p}_x] &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} F_x(\vec{r}) \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle_t &= \langle F_x(\vec{r}) \rangle
\end{aligned}$$

$$\text{Kraft: } \vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r})$$

Analog für $\langle \hat{p}_y \rangle_t$ und $\langle \hat{p}_z \rangle_t$.

$\frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t = \langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t$
$\frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{r}} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t$

„Ehrenfest-Gleichungen“

Newton:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{p}(t) &= \vec{F}(\vec{r}) = \vec{F}(\vec{r}(t)) \\ \frac{d}{dt} \vec{r}(t) &= \frac{\vec{p}(t)}{m} \end{aligned}$$

Achtung Im Allgemeinen ist

$$\langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t \neq \vec{F}(\langle \vec{r} \rangle_t)$$

Spezialfälle:

- $\vec{F} = \text{const} \hat{=} V(x) = -\alpha x + c$
insbesondere $\vec{F} = 0 \hat{=} V(x) = \text{const}$
(Siehe Teilchen im Potentialtopf, bis auf Sprungstellen des Topfes)
- $\vec{F} = \beta \vec{r}$
u.a. $F_x = \beta x \Rightarrow V(x) = -\frac{1}{2}\beta x^2 + c$
auch $F_x = \beta x + j \Rightarrow V(x) = -\frac{1}{2}\beta x^2 - jx + c$
 $\langle F_x(\vec{r}) \rangle = \beta \langle x \rangle + j = F_x(\langle x \rangle)$

\Rightarrow Beim harmonischen Oszillator verhält sich der Erwartungswert $\langle \vec{r} \rangle_t$ wie die klassische Bahnkurve
Also: $\langle \vec{r} \rangle_t = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$

Auch für räumlich schwach veränderliche Kräfte gilt näherungsweise $\langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t = \vec{F}(\langle \vec{r} \rangle_t)$

4.5 Streuzustände beim Potentialtopf

(Abb Q32)

Bereich I: $V(x) = 0, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$

$\varphi(x) \sim e^{\pm i q x}, q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E} \quad E > 0!$

$\varphi^{\text{I}}(x) = A e^{i q x} + B e^{-i q x}$

Bereich II: $V(x) = -V_0$

$\varphi^{\text{II}}(x) = C e^{i k x} + D e^{-i k x}, k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)}$

Bereich III: $V(x) = 0$

$\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{i q x} + G e^{-i q x}, q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$

Physikalische Überlegung

$$\begin{aligned} e^{i q x} \hat{=} \text{Ortsanteil von } \psi(x, t) &= e^{\frac{E t}{i \hbar}} e^{i q x} \\ &= \underbrace{e^{i \left(q x - \frac{E}{\hbar} t \right)}}_{\text{Konstante Phase:}} \\ &\quad \text{größere Zeit} \Rightarrow \text{„größerer“ Ort} \end{aligned}$$

(Abb Q33)

→ Welle läuft von „links“ nach „rechts“

Bezeichnung:

e^{iqx} ist „Welle“, die von links einläuft

Be^{-iqx} : Welle, die bei $x = -a$ reflektiert wird

(Abb Q34)

Annahme: Für $x > a$ tritt keine Reflexion auf $G \Rightarrow 0$

B, C, D und F folgen aus Stetigkeit von $\varphi(x)$ und $\varphi'(x)$ bei $x = \pm a$

Zunächst: Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x) = \frac{\hbar}{i2m} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \right)$$

Für $\psi(x, t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t} \varphi(x)$

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{i2m} \left(\varphi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) - \underbrace{\varphi(x) \frac{\partial}{\partial t} \varphi^*(x)}_{(\varphi(x) \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x))^*} \right) \\ j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left(\varphi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) \right) \end{aligned}$$

Bereich I:

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left(\left(e^{-iqx} + B e^{iqx} \right) \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (e^{iqx} + B e^{-iqx})}_{iq(e^{iqx} - B e^{-iqx})} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m} q - \frac{\hbar}{m} q |B|^2 \\ &= \underbrace{j_{ein}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{j_{ref}}_{\text{reflektierte Welle}} \\ j_{ein} &= \frac{\hbar}{m} q (= \text{const}) \\ j_{ref} &= \frac{\hbar}{m} q |B|^2 (= \text{const}) \end{aligned}$$

Definition: $R := \frac{|j_{ref}|}{|j_{ein}|}$ Reflexionskoeffizient

Hier: $R = \frac{\frac{\hbar}{m} q |B|^2}{\frac{\hbar}{m} q} = |B|^2$

Bereich III: $\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{iqx}$

$$j_{trans} = \frac{\hbar}{m} q |F|^2$$

$T := \left| \frac{j_{trans}}{j_{ein}} \right|$ Transmissionskoeffizient

Hier: $T = |F|^2$

Berechnung von B, C, D, G

$$1. \varphi^I(-a) = \varphi^{II}(-a)$$

$$e^{-iqa} + Be^{iqa} = Ce^{-ika} + De^{+ika} \quad (27)$$

$$2. \frac{d}{dx}\varphi^I(-a) = \frac{d}{dx}\varphi^{II}(-a)$$

$$\frac{d}{dx}\varphi^I(x) = iq(e^{iqx} - Be^{-iqx})$$

$$iq(e^{-iqa} - Be^{iqa}) = ik(Ce^{-ika} - De^{+ika}) \quad (28)$$

$$3. \varphi^{II}(a) = \varphi^{III}(a)$$

$$Ce^{ika} + D^{-ika} = Fe^{iqa} \quad (29)$$

$$4. \frac{d}{dx}\varphi^{II}(a) = \frac{d}{dx}\varphi^{III}(a)$$

$$ik(Ce^{ika} - De^{-ika}) = iqFe^{iqa} \quad (30)$$

$$5. (27) + \frac{(28)}{iq}$$

$$2e^{-iqa} = \left(1 + \frac{k}{q}\right) Ce^{-ika} + \left(1 - \frac{k}{q}\right) De^{+ika} \quad (31)$$

$$6. (29) + \frac{(30)}{ik}$$

$$2Ce^{ika} = F\left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{iqa} \quad (32)$$

$$7. (29) - \frac{(30)}{ik}$$

$$2De^{-ika} = F\left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{iqa} \quad (33)$$

(32),(33) in (31) einsetzen und nach F auflösen

\Rightarrow

$$F = e^{-2iqa} \left(\cos(2ka) - i \sin(2ka) \frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^{-1}$$

$$T = |F|^2 = \frac{1}{\cos^2(2ka) + \left(\frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^2 \sin^2(2ka)}$$

$$\cos^2(2ka) = 1 - \sin^2(2ka), (k^2 + q^2)^2 = k^4 + q^4 + 2k^2q^2 \Rightarrow$$

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^2 \sin^2(2ka)}$$

Analog:

$$B = iF \frac{k^2 - q^2}{2kq} \sin(2ka)$$

$$R = |B|^2 = |F|^2 \left(\frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2ka)$$

\Rightarrow

$$R + T = 1$$

Diskussion von T

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{E(E+V_0)} \sin^2 \left(2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \right)}$$

(Abb Q35)

(Abb Q36)

$$L = 2a$$

- Transmission hängt von E ab!

- $T = 1$ für bestimmte Energien

$$\sin \left(2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \right) = 0$$

$$\Rightarrow 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} = n\pi$$

$$(E + V_0) = \frac{n^2 \pi^2}{(2a)^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2} n^2 \pi^2}_{\text{Energien des unendlich hohen Topfes}}$$

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2nL^2}$$

$E_n \hat{=}$ Energien mit $T = 1$

\Rightarrow Da $E_n > 0$

$$\begin{aligned} -V_0 + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2nL^2} &> 0 \\ n^2 &> \frac{V_0 2nL^2}{\hbar^2 \pi^2} \\ &\hat{=} \text{minimaler Wert von } n \end{aligned}$$

$E_n \hat{=}$ Resonanzenergien („Streuressonanzen“ bei diesen Energien $\hat{=}$ Transmission = 1)

Zusammenfassung (Abb Q37)

4.6 Potentialwall

(Abb Q38)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$0 < E < V_0$$

Bereich I:

$$\varphi^{\text{I}}(x) = e^{iqx} + B e^{-iqx}, \quad q = \sqrt{E \frac{2m}{\hbar^2}}$$

Bereich II: $V(x) = V_0$

Da $E < V_0$:

$$\varphi^{\text{II}}(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Bereich III:

$$\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{iqx}$$

B, C, D, F folgen aus Stetigkeitsbedingungen

→ Analoge Rechnung (siehe 4.5 auf Seite 46) mit κ statt ik , bzw. $-V_0$ statt V_0

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2 \left(2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \right)}$$

Da $E < V_0 \Rightarrow \sin$ mit imaginärem Argument

$$\sin(ix) = i \sinh(x)$$

\Rightarrow

$$T(E) = \frac{1}{1 - \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sinh^2 \left(2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \right)}$$

$T > 0$ für $E > 0 \hat{=}$ endliche Transmission (im Gegensatz zur klassischen Physik) „Tunneleffekt“

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (Abb Q39)

Betrachte Fall $2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \gg 1$ d.h. $E \ll V_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a^2}$

$$\sinh(x) = \frac{1}{2} (e^x - e^{-x}) \stackrel{x \gg 1}{\approx} \frac{1}{2} e^x$$

Dann kann auch die „1“ im Nenner von $T(E)$ vernachlässigt werden

$$T(E) \approx \frac{16 (V_0 - E) \cdot E}{V_0^2} e^{-4a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}}$$