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.

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

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

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

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

„Einfache“ Lösung: „ebene Welle“

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

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

Wellenpaket

1.1.3 Wellencharakter

- Beugung
- Brechung
- Interferenz

1.1.4 Bemerkungen

- $\vec{\mathcal{E}}$-Feld als ebene Welle $\rightarrow \vec{B}(\vec{r},t) = \frac{1}{\omega}\left(\vec{k} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right)$
- Allgemein:
  Energie des Feldes im Volumen V
  $E = \frac{\varepsilon_0}{2}\int\limits_V \left|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r + \frac{1}{\mu_0}\frac{1}{2}\int\limits_V \left|\vec{B}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$
  Ebene Welle: $E = \varepsilon_0 \int\limits_V \left|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$
  „Energie ist proportional zu $\left|\vec{\mathcal{E}}\right|^2$"
  Impuls eines eltromag. Feldes
  $\vec{P}_{Feld} = \varepsilon_0 \int\limits_V \left(\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) \times \vec{B}(\vec{r},t)\right) d^3r$
  Ebene Welle: $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega}\varepsilon_0 \int\limits_V \mathcal{E}^2(\vec{r},t)\, d^3r$

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

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

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

Erklärung durch Planck mit folgender Annahme:

$\boxed{\text{Elektromagnetische Strahlung wird (von den Atomen in den Wänden) in Form von „Quanten" der Energie } E = h\nu \cdot n\ (n = 1, 2, 3, ...) \text{ abgegeben}}$

„Quantenhypothese von Max Planck"

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

Photoeffekt (1905) (Abb 3)

<u>Energie pro Elektron</u>

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

- Zahl der emitieren Elekronen 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 <u>Anzahl</u> der emitierten Elektronen

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

P von Photon:

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

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)

|Zentrifugalkraft| = |Coulombkraft|

$$\frac{mv^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \tag{1}$$

Energie: $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$

<u>Probleme:</u>

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

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

$\Rightarrow E_n = -\underbrace{\frac{e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\, 2\hbar^2}}_{13{,}6059\text{eV}} \frac{1}{n^2}$

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

1.3 Materiewellen

Problem: Klassische Physik beschreibt „Mikrowelt“ nicht genau

Stand der Physik 1923

	Licht	Materie
„klassische“ Experimente	Bei Ausbreitung Wellencharakter → Maxwell-Gl	Makroskopische Körper: Teilchencharakter → Newton-Gl
„nicht klassische“ Experimente	Bei Emission und Absorbtion: Teilchencharakter $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$	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:

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

Hypothese von de Broglie

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

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

Ausbreitungsgeschwindigkeit

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

2 Wellenmechanik des freien Teilchens

2.1 Wellengleichung

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

Freies Teilchen

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

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Idee: Wellenpaket beschreibt Teilchen

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

2.2 Wellenpaket

2.2.1 Eindimensional

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

(Abb 5)

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

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

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

Also:

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

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

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

Bei $t = 0$:

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

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

(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)

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

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

$\psi \sim$ Normierungsfaktor Gausfunktion: Ebene Welle

(Abb 7)

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

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

2.2.3 Breite B des Wellenpakets

(Abb 8)

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

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

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

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

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

(Abb 9)

$\rightarrow$ Wellenpaket läuft auseinander

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

Widerspruch zu experimenteller Erfahrung

Idee: Born

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

1. Elektron: $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$kg, Radius: $r = 2,8 \cdot 10^{-15}$m, $\gamma = r$
   $T = 6,8 \cdot 10^{-23}$s

2. Bleikugel: $m = 0,1$g, $r = 1,3 \cdot 10^{-3}$m, $\gamma = r$
   $T = 1,6 \cdot 10^{+24}$s $= 5,1 \cdot 10^{16}$Jahre

2.3 Bedeutung der Wellenfunktion

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

2.3.1 Doppelspaltexperiment

(Abb 10)

(Folie Internet)

„Auftreffpunkte“ einzelner Photonen sind zufällig.

Viele Photonen $\rightarrow$ regelmäßiges Beugungsbild

Auftreffen erfolgt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

Max Born (1926)

Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumen V zu finden

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

2.3.2 Normierung

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

$\Rightarrow \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\, d^3r = 1 \rightarrow \psi(\vec{r},t)$: quadratintegrable Funktion

$\Rightarrow$ Wellenfunktion fällt im „Unendlichen“ schnell ab

2.3.3 Periodische Funktion

Normierung auf Volumen V

$$\int\limits_V \left|\psi(\vec{r},t)^2\, d^3r = 1\right|$$

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

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

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

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

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“ $\Rightarrow$Kentniss 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.

$\boxed{\text{Ort und Impuls sind nicht gleichzeitig genau bestimmbar}}$

2.4 Quantenmechanische Erwartungswerte

2.4.1 Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Zufällige Größen $X_1, X_2, .. X_N$ 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

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

Unschärfe, Unsicherheit

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

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

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

Erwartungswert des Ortes

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}\rangle &= \int\limits_{\mathbb{R}^3} \vec{r}\varrho\left(\vec{r},t\right) d^3r \\ &= \int\limits_{\mathbb{R}^3} \vec{r}\overset{\star}{\psi}\left(\vec{r},t\right)\psi\left(\vec{r},t\right) d^3r \\ &= \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}\left(\vec{r},t\right)\vec{r}\psi\left(\vec{r},t\right) d^3r\end{aligned}$$

Allgemein

$$\boxed{\langle f\left(\vec{r}\right)\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}\left(\vec{r},t\right) f\left(\vec{r}\right)\psi\left(\vec{r},t\right) d^3r}$$

2.5 Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

2.5.1 Plausibilitätsbetrachtung

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

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

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

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

Umkehrung

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

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

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

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

Denn:

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

$$\boxed{\int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{f}\left(\vec{r}\right) g\left(\vec{r}\right) d^3r = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{f}}\left(\vec{k}\right)\tilde{g}\left(\vec{k}\right) d^3k}$$

Parsewalsches Theorem

Beweis

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

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

$$\begin{aligned}
\int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r}, t)\, \psi(\vec{r}, t)\, d^3 r \quad &= \quad \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k}, t\right) \psi\left(\vec{k}, t\right) d^3 r \\
\int\limits_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r \quad &= \quad \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \left|\psi\left(\vec{k}, t\right)\right|^2 d^3 r
\end{aligned}$$

und somit die gemeinsame Normierung

2.5.2 Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \left\langle \vec{k} \right\rangle = \hbar \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}} \ldots$$

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

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

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

„Wellenfunktion im Impulsraum“

$$\langle \vec{p} \rangle\, 0 \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\varphi}(\vec{p}, t)\, \vec{p} \varphi(\vec{p}, t)\, d^3 r$$

Erwartungswert des Ortes

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

Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}} \left(\vec{k}, t\right) \vec{k} \tilde{\psi} \left(\vec{k}, t\right) d^3 k$$

2.6 Impulsoperator

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

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

Da

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{f}(\vec{r},t)\, g(\vec{r},t)\, d^3r = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{f}}\left(\vec{k},t\right) g\left(\vec{k},t\right) d^3k$$

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

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\, \vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\, d^3r &= \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k},t\right) i\vec{k}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) d^3k \\ &= \frac{1}{\hbar} \langle \vec{p} \rangle \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\langle \vec{p} \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\, d^3r}$$

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

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

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

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

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

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

Dann folgt

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

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

$$\boxed{\langle \vec{r} \rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\phi}(\vec{p},t)\left(-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{p}}\right)\phi(\vec{p},t)\, d^3p}$$

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:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\phi}(\vec{p},t)\,\vec{p}\phi(\vec{p},t)\, d^3p$$

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

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

$\Rightarrow$ Quantenmechanische Erwartungswerte haben allgemein die Form

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\hat{O}\psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

(Ortsdarstellung)

bzw.

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}} \overset{\star}{\phi}(\vec{p},t)\,\hat{O}\phi(\vec{p},t)\, d^3p$$

(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 $\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$	$\vec{r} \times \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)$	$i\hbar\left(\vec{\nabla}_{\vec{p}} \times \vec{p}\right)$

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

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

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

folgt

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

Klassische Mechanik

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

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

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

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

$\hat{H}$; „Hamiltonoperator“

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

$H(\vec{p}, \vec{r})$	$\longrightarrow$	$\hat{H}\left(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}\right)$
klassische Mechanik		Quantenmechanik (Ortsdarstellung $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$, $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$)

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

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

$\hat{H}$ 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: $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V\left(i\hbar \vec{\nabla} \vec{p}, t\right)$

Konzept:

1. Stelle Hamiltonfuntion 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 $\vec{d}$ $\hat{O} = \hat{T}_{\vec{d}}$: $\hat{T}_{\vec{d}}\psi(\vec{r},t) = \psi\left(\vec{r}+\vec{d},t\right)$

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

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

Quantenmechanik:

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

Operatoren wirken auf alles, was rechts von ihnen steht!

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

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

Der Gehalt dieser Gleichung wird durch folgende Kurzschreibweise zum Ausdruck gebracht

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

Definition:

Für Operatorn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ bezeichnet man

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

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

Erinnerung

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

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

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

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

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

Vertauschungsrelation für Ort und Impuls

3.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

In einer Dimension:

$$\varrho(x, t) = \overset{\star}{\psi}(x, t)\, \psi(x, t)$$

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

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

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

Mit (7) + (8)

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

Da

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

$\Rightarrow$

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi\frac{\partial}{\partial x}\overset{\star}{\psi} - \overset{\star}{\psi}\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$\frac{\partial\varrho(r,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\frac{\hbar}{i2m}\left(\overset{\star}{\psi}\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\overset{\star}{\psi}\right)}_{j(x,t)\ \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte}} = 0$$

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

Kontinuitätsgleichung

In drei Dimensionen:

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial\varrho(\vec{r},t)}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j}(\vec{r},t) = 0 \\ \vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i2m}\left(\overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\right)\end{gathered}}$$

3.3.1 Physikalische Bedeutung

Eindemensional:

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

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

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

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

(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:

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

$\Rightarrow$

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

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 $\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t) = Ef(t) \qquad (9)$$

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

Stationäre Schrödingergleichung

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

(9) ist direkt lösbar:

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

$\Rightarrow$

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

3.4.1 Hinweis

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

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

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

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

$$\Rightarrow \varphi(x) = Ae^{ikx}$$

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

$\rightarrow$ Quantenzahl $\hat{=}\ k$

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

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

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

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

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

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

Eindimendionales System $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$

(Abb Q13)

$V_0 \to \infty$: Das Teilchen hält sich nur im Breich II auf

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Schrödingergleichung im Bereich II

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

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$x = L$

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

$\Rightarrow$

$$kL = n\pi$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

Erinnerung
(Abb Q13)
$\varphi^{\mathrm{I}}(x) = 0 = \varphi^{\mathrm{III}}(x)$

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

$\varphi^{\mathrm{II}}(0) = 0 = \varphi^{\mathrm{II}}(L)$; im Bereich II: $V(x) = 0$
$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \varphi(x) = e^{ikx}$ bzw. $\varphi(x) = e^{-ikx}$
Linearkombinationen der Lösung $\rightarrow$ erfüllen der Randbedingungen

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$ 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: $A = 2ai$

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

$\Rightarrow$

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

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“

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

$n = 1, 2, 3, 4, ..$

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

$n = -1, -2, ..$: $\sin\left(\frac{\pi}{L}(-n)x\right) = -\sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right)$, $\varphi_{-n}(x) = -\varphi_n(x)$. 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:

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

$\Rightarrow$

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

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 (<u>diskretes</u> 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 $\chi(x)$

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

(Analog zu $\overset{\star}{\vec{b}} \cdot \vec{a} = \sum_{j=1}^{n} \overset{\star}{b}_j a_j$ mit $\vec{a} = (a_1, a_2, ..)$, $\vec{b} = (b_1, b_2, ..)$)

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

<u>Hier:</u>

$$\begin{aligned}
(\varphi_n, \varphi_{n'}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\varphi}_n(x)\, \varphi_{n'}(x)\, dx \\
&= \int_{0}^{L} \sqrt{\frac{2}{L}} sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n'x\right) dx \\
&= \delta_{n,n'} \text{ (analog zu Forierreihen)}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Eigenfunktionen sind <u>orthogonal</u>

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

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

c_n: Entwicklungskoeffizient (analog zu Fourierdarstellung)

3.5.5 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für Potentiale

Bisher:

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

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

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

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

$t = 0$:

$$c_n = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\varphi}_{n'}(x)\,\psi(x,0)\,dx$$

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

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:

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

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

Klassisch:

(Abb Q17)

3.6 Dreidimensionale Separable Potentiale

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

Seperables 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

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

Soll für alle x, y, z gelten $\Rightarrow$ Terme sind alle <u>konstant</u>

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

$\Rightarrow$

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

n_x, n_y, n_z: Quantenzahlen

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

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

<u>Energien:</u>

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

Dann ist es notwendig <u>drei</u> <u>eindimensionale</u> 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

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

N: Normierungsfaktor

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

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

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

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

3.7.1 Adjungierter Operator $\hat{O}^+$

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

$\hat{O}^+$ 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)

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\chi}(x)\, \hat{O}\varphi(x)\, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\overset{\star}{\chi}(x)}_{u} \underbrace{\frac{d}{dx}\varphi(x)}_{v'} dx \\ \text{partielle Integration} &= \underbrace{\Big[\underbrace{\overset{\star}{\chi}(x)}_{u} \underbrace{\varphi(x)}_{v}\Big]_{-\infty}^{\infty}}_{0} - \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\frac{d}{x}\overset{\star}{\chi}(x)\right)}_{u'} \underbrace{\varphi(x)}_{v} dx\end{aligned}$$

$\overset{\star}{\chi}(\infty) = \overset{\star}{\chi}(-\infty) = 0$, $\varphi(\infty) = \varphi(-\infty) = 0$, da χ, φ quadratinegrabel
$\Rightarrow$

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

Also

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

3.7.2 Speziell

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

Selbstadjungierter Operator (hermitescher Operator)
Diese Operatoren sind in der Quantenmnechanik von besonderer Bedeutung
(Hermitescher Operator: Definitionbereich von $\hat{O}$ und $\hat{O}^{+}$ können unterschiedlich sein)

Beispiele

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

$$\int \overset{\star}{\chi}(\vec{r})\, \vec{r}\varphi(\vec{r})\, d^3r = \int (\vec{r}\chi(\vec{r}))^{\star}\, \varphi(\vec{r})\, d^3r$$

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

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

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

   $\hat{p}_x^{+} = \hat{p}_x \Rightarrow \hat{p}_x$ ist ein hermitescher Operator
   Analog $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ ist ebenfalls hermitesch

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

$$\begin{aligned}
\int \overset{\star}{\chi}(\vec{r})\,\hat{O}^2\varphi(\vec{r})\,d^3r &= \int \overset{\star}{\chi}(\vec{r})\,\hat{O}\left(\hat{O}\varphi(\vec{r})\right)d^3r \\
&= \int \left(\hat{O}^+\chi(\vec{r})\right)^\star\left(\hat{O}\varphi(\vec{r})\right)d^3r \\
&= \int \left(\hat{O}\chi(\vec{r})\right)^\star\left(\hat{O}\varphi(\vec{r})\right)d^3r \\
&= \int \left(\hat{O}^+\hat{O}\chi(\vec{r})\right)^\star\varphi(\vec{r})\,d^3r \\
&= \int \left(\hat{O}^2\chi(\vec{r})\right)^\star\varphi(\vec{r})\,d^3r
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \left(\hat{O}^2\right)^+ = \hat{O}^2$
$\Rightarrow \hat{\vec{p}}^2$ ist hermitesch (da $\hat{\vec{p}}$ hermitesch ist)
$V\left(\hat{\vec{r}}\right)$ 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

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

$\Rightarrow \left\langle \hat{O}\right\rangle$ ist reel

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind <u>immer</u> reell

Eigenwerte

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

$\Rightarrow \lambda_n$ reell

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind <u>immer</u> reell

Operthogonalität der Eigenfunktionen

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

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

<u>Fallunterscheidung</u>

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

   $$\boxed{\int \overset{\star}{\varphi}_{n'}\varphi_n(\vec{r})\,d^3r = \delta_{n.n'}}$$

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

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

   $\Rightarrow$

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

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

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

$\Rightarrow$

Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind orthogonal zueinander (wählbar)

$\hat{=}$

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

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

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

Es gilt

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

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

$$\boxed{\int \overset{\star}{\varphi}_k(x)\,\varphi_{k'}(\vec{r})\,dx = \delta(k-k')}$$

„Normierung auf δ-Funktion“

<u>Analog in drei Dimensionen</u>:

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

$\Rightarrow$

$$\boxed{\int \overset{\star}{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{r})\,\varphi_{\vec{k}'}(\vec{r})\,d^3r = \delta\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)}$$

3.8 Vollständiges Orthogonalsystem (VONS)

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

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

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 hermitsche Operatoren dargestellt.

3. Die zeitliche Entwicklungg der Wellenfunktion wird durch die Schrödinger-Gleichung

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

   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)

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

<u>Falls</u> $\varphi(x)$ 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

$$\int\limits_{x_0-d}^{x_0+d}\underbrace{\varphi''(x)}_{\frac{d}{dx}\varphi'(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}\int\limits_{x_0-d}^{x_0+d}(V(x)-E)\,dx$$

$$=\varphi'(x_0+d)-\varphi'(x_0-d)$$

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

$$\lim_{d\to 0}\left(\varphi'(x_0+d)-\varphi'(x_0-d)\right)=0$$

$\Rightarrow \varphi'(x)$ 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: $\varphi=e^{\pm ikx}\quad\Rightarrow$

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

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

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

$\Rightarrow$

$$\varphi^{(\mathrm{I})}(x)=Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x}$$

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

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

$$\boxed{\varphi^{\mathrm{I}}(x)=Ae^{+\kappa x}}$$

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

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

$\Rightarrow$

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

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

oder

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

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

Bereich III: Analog zu I

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

$\Rightarrow$

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

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi^{\text{I}'}(x) &= \kappa Ae^{\kappa x}\\ \varphi^{\text{II}'}(x) &= -kC\sin(kx) + kD\cos(kx)\\ \varphi^{\text{III}'}(x) &= -\kappa Ge^{-\kappa x}\end{aligned}}$$

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

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

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

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

$$\begin{aligned}\kappa Ae^{-\kappa a} &= -kC\sin(-ka) + kD\cos(-ka)\\ &= kC\sin(ka) + kD\cos(ka) \qquad (13)\end{aligned}$$

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

$$C\cos(ka) + D\sin(ka) = Ge^{-\kappa a} \tag{14}$$

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

$$-kC\sin(ka) + kD\cos(ka) = -\kappa Ge^{\kappa x} \tag{15}$$

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

(12) + (14)

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

(12) − (14)

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

(13) + (15)

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

(13) − (15)

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

(16), (19)

$$\kappa 2C\cos(ka) = 2Ck\sin(ka) \tag{20}$$

$\Rightarrow$

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

(17), (18)

$$-\kappa 2D\sin(ka) = 2Dk\cos(ka) \tag{21}$$

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

Also: wir erhalten Lösungen des Gleichungssystems

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

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

$\hat{=}$ gerade Funktion

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

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

$\hat{=}$ ungerade Funktion

4.2.2 Auswertung der Lösungsbedingung

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

Gerade Zustände

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

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

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

(Abb Q22)

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

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

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

Energie der Zustände mit gerader Wellenfunktion

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

Ungerade Zustände

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

$\Rightarrow$

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

Es gibt <u>nicht</u> für alle Werte von V_0 eine Lösung.

Nur Lösung für $\boxed{V_0 \geq \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}}$

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

$\Rightarrow$

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

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:

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

$\Rightarrow$

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

Energie

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

Quantenmechanische Systeme

- Schwingungen von Atomen inMolekülen und Festkörpern
  Beispiel: H_2 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

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

Lösung durch

- Potentenzreihenansatz
- „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

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

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

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

2. Schritt: Ansatz für $\phi(y)$

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

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

Ansatz:

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$ Ansatz für alle y:

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

$\Rightarrow$

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

Somit wird aus

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

folgende Differentialgleichung für $f(y)$

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

Hermitesche 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 $l = j$

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

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

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

$\sim = 0 \Rightarrow$

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

Rekursionsformel für die Koeffizienten

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

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

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 Potentzreihe <u>nicht</u> abbricht.

Zwischenrechnung Betrachte „große“ Werte von j

$j \to \infty$:

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
B_{j+2} &= \frac{1}{\left(\frac{j+2}{2}\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)} = B_j \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)} \\
\frac{B_{j+2}}{B_j} &= \frac{1}{\frac{j}{2}+1} \underset{j\to\infty}{=} \frac{1}{\frac{j}{2}} = \frac{2}{j}\left(\text{wie } \frac{A_{j+2}}{A_j}\right)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ 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

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

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

Dies tritt nach (22) auf für:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

Energienieveaus des harmonischen Oszillators

(Abb Q29)

Grundzustandsenergie

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

E_n:

- diskret
- äquidistant

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

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

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

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

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

$$A_2^{(2)} = \frac{2\cdot 0 - 2\cdot 2}{2\cdot 1} A_0^{(2)} = -2A_0^{(2)}$$
$$f_2(y) = A_0^{(2)}\left(-2y^2+1\right)$$

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

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

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

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 Polynmoe.

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

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

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

folgt

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

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

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

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

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

(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 <u>n</u> 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 Aufenthaltwahrscheinlichkeitsdichte

(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 $m = 0,1\text{kg}$, $\omega = 10\text{Hz}$, $x_0 = 1\text{cm}$

$\Rightarrow$

$$E = \frac{1}{2}kx_0^2 = \frac{1}{2} \cdot 10^{-3}\frac{\text{kgm}^2}{\text{s}^2}$$

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“

Diffenrentialgleichung

$$\boxed{H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0}$$

$$\begin{aligned} H_n(x) &= \sum_{j=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \frac{(-1)^j n!}{j!(n-2j)!}(2x)^{n-2j} \qquad (23) \\ \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor &= \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{n-1}{2} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \end{aligned}$$

(folgt aus Rekursionsformel)

Rodrigues Formel

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

Beweis z.B.

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

Rekursionsformeln

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

folgt durch Ableitung von (23)

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

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

$\Rightarrow$

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

Erzeugende Funktionen

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

Orthogonalität (bezüglich e^{-x^2})

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\varphi}_n(x)\,\varphi_{n'}(x)\,dx = \delta_{n,n'}$$

$\Rightarrow$

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

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:

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

Beispiel I: Überlagerung von 3 Zuständen

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

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

$\Rightarrow$

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

(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 <u>nur</u> 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)

$$\underbrace{(26)}_{\text{mit } t=0}\int\overset{\star}{\varphi}_n(x)\,dx\Rightarrow\int\overset{\star}{\varphi}_n\psi(x,0)\,dx=\sum_{n'}c_{n'}\underbrace{\int\overset{\star}{\psi}_n(x)\,\psi_{n'}(x)\,dx}_{\delta_{n,n'}}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{c_n=\int\overset{\star}{\varphi}_n(x)\,\psi(x,0)\,dx}$$

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

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

Einsetzen in (26) liefert

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

(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 $\left\langle\hat{O}\right\rangle_t=\int\overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{O}\psi(x,t)\,dx$

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

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \hat{H}\psi\\ -i\hbar\frac{\partial\overset{\star}{\psi}}{\partial t} &= \overset{\star}{\hat{H}}\overset{\star}{\psi}\underset{\text{für }\hat{H}\text{ reell}}{=}\hat{H}\overset{\star}{\psi}\end{aligned}$$

$$= \tfrac{1}{i\hbar}\int\left(-\hat{H}\overset{\star}{\psi}(x,t)\right)\hat{O}\psi(x,t)\,dx + \tfrac{1}{i\hbar}\int\overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{O}\hat{H}\psi(x,t)\,dx + \underbrace{\int\overset{\star}{\psi}(x,t)\,\frac{\partial\hat{O}}{\partial t}\psi(x,t)\,dx}_{\left\langle\frac{\partial\hat{O}}{\partial t}\right\rangle_t}$$

$$\frac{d}{dt}\left\langle\hat{O}\right\rangle_t = \tfrac{1}{-i\hbar}\int\left(\overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{H}\hat{O}\psi(x,t) - \overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{O}\hat{H}\psi(x,t)\right)d^3r + \left\langle\tfrac{\partial\hat{O}}{\partial t}\right\rangle_t$$

$$= \tfrac{1}{-i\hbar}\int\overset{\star}{\psi}(x,t)\left[\hat{H},\hat{O}\right]\psi(x,t)\,d^3r + \left\langle\tfrac{\partial\hat{O}}{\partial t}\right\rangle_t$$

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

Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

Anwendung

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

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

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

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

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:

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

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

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

$$\boxed{\frac{d}{dt}\left\langle \hat{\vec{p}} \right\rangle_t = \left\langle \vec{F}(\vec{r}) \right\rangle_t}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\left\langle \hat{\vec{r}} \right\rangle_t = \frac{1}{m}\left\langle \hat{\vec{p}} \right\rangle_t}$$

„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

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

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 $\left\langle \vec{F}(\vec{r}) \right\rangle_t = \vec{F}\left(\langle \vec{r} \rangle_t\right)$

4.5 Streuzustände beim Potentialtopf

(Abb Q32)

Bereich I: $V(x) = 0$, $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = E\varphi(x)$
$\varphi(x) \sim e^{\pm iqx}$, $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$ $E > 0!$
$\varphi^{\mathrm{I}}(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$

Bereich II: $V(x) = -V_0$
$\varphi^{\mathrm{II}}(x) = Ce^{ikx} + D^{-ikx}$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$

Bereich II: $V(x) = 0$
$\varphi^{\mathrm{III}}(x) = Fe^{iqx} + Ge^{-iqx}$, $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$

Physikalische Überlegung

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

(Abb Q33)

$\rightarrow$ 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 $x = \pm a$

<u>Zunächst</u>: Wahrscheinlichkeitsstromdichte

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

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

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

<u>Bereich I</u>:

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

<u>Definition</u>: $R := \frac{|j_{ref}|}{|j_{ein}|}$ Reflexionskoeffizient

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

<u>Bereich III</u>: $\varphi^{\text{III}}(x) = Fe^{iqx}$

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

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

Hier: $T = \left|F\right|^2$

Berechnung von B, C, D, G

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

$$e^{-iqa} + Be^{iqa} = Ce^{-ika} + De^{+ika} \tag{27}$$

2. $\frac{d}{dx}\varphi^{\mathrm{I}}(-a) = \frac{d}{dx}\varphi^{\mathrm{II}}(-a)$
   $\frac{d}{dx}\varphi^{\mathrm{I}}(x) = iq\left(e^{iqx} - Be^{-iqx}\right)$

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

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

$$Ce^{ika} + D^{-ika} = Fe^{iqa} \tag{29}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$

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

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

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

Analog:

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

$\Rightarrow$

$$\boxed{R + T = 1}$$

Diskussion von T

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

(Abb Q35)

(Abb Q36)

$L = 2a$

- Transmission hängt von E ab!
- $T = 1$ für bestimmte Energien
  $\sin\left(2a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)}\right) = 0$
  $\Rightarrow 2a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)} = n\pi$
  $(E+V_0) = \frac{n^2\pi^2}{(2a)^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{L^2}n^2\pi^2}_{\text{Energien des unendlich hohen Topfes}}$

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

  $E_n \hat{=}$ 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 („Streuresonanzen“ bei diesen Energien $\hat{=}$ Tranmission $= 1$)

Zusammenfassung (Abb Q37)

4.6 Potentialwall

(Abb Q38)

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

<u>$0 < E < V_0$</u>

<u>Bereich I</u>:

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

<u>Bereich II</u>: $V(x) = V_0$

<u>Da $E < V_0$</u>:

$$\varphi^{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x},\ \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

<u>Bereich III</u>:

$$\varphi^{\mathrm{III}}(x) = Fe^{iqx}$$

B, C, D, F folgen aus Stetigkeitsbedingungen

$\rightarrow$ 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

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

$\Rightarrow$

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

$T > 0$ für $E > 0 \mathrel{\hat{=}}$ 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. $E \ll V_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{4a^2}$

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

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

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

Tunneleffekt Sei $E \ll V_0$

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

Exponentialer Abfall:

- Breite des Walls
- Wurzel der Masse
- Wurzel $(V_0 - E)$

Allgemeine Form einer Barriere (Abb Q40)

Näherungsformel Transmission durch j-ten Wall

$$T_j = \frac{16(V_j - E)E}{V_j^2} e^{-2\Delta x\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E)}}$$

Näherungsweise

$$T_j \approx e^{-2\Delta x\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E)}}$$

Gesamte Transmission

$$
\begin{aligned}
T &= T_1 \cdot T_2 \cdot \ldots \cdot T_N = \prod_{j=1}^{N} T_j \\
&= \prod_{j=1}^{N} e^{-2\Delta x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E)}} \\
&= e^{-2\Delta x \sum\limits_{j=1}^{N} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E)}}
\end{aligned}
$$

Grenzfall $N \to \infty$ (unendlich feine Unterteilung)

$$
\boxed{T = e^{-2\int\limits_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}dx}}
$$

mit $V(x_A) = E$, $V(x_B) = E$

„Gamow-Faktor“

(Abb Q41)

Rechnung wie beim Potentialtopf 4.5 auf Seite 46 mit V_0 statt $(-V_0)$

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

(Abb Q42)

4.7 Wellenpakete an Potentialbarrieren

Bisher: uneigentliche Eigenzustände

(Abb Q43)

Wellenpaket

$$
\psi(x,t) = \int\limits_0^\infty g(q)\,\varphi_q(x)\,e^{\frac{E_q t}{i\hbar}}dq
$$

$$
g(q) \quad z.B. \quad e^{-j(q-q_0)^2} \quad \text{Qauß'sches Wellenpaket, zentriert um } q_0
$$

Energie

$$
E = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{H}\psi(x,t)\,dx
$$

$$
\hat{H}\psi(x,t) = \int\limits_0^\infty g(q)\,E_q\varphi_q(x)\,e^{\frac{E_q t}{i\hbar}}dq
$$

$$
\begin{aligned}
E = & \int\limits_{-\infty}^{\infty} \overset{\star}{\psi}(x,t)\,\hat{H}\psi(x,t)\,dx \\
= & \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_0^\infty g(q')\,E_{q'}\varphi_{q'}(x)\,e^{\frac{E_{q'} t}{i\hbar}}dq' \int\limits_0^\infty g(q)\,E_q\varphi_q(x)\,e^{\frac{E_q t}{i\hbar}}dq\,dx
\end{aligned}
$$

$$
\text{Mit} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi_{q'}(x)\,\varphi_q(x)\,dx = \delta(q - q')
$$

(Normierung der uneigentlichen Eigenfunktion) „auf δ-Funktion”

$$
\Rightarrow E = \int\limits_0^\infty g(q)\,\overset{\star}{g}(q)\,E_q dq = \int\limits_0^\infty |g(q)|^2\,E_q dq
$$

(Folie: „Wellepaket an einem Potentialberg“, Folie: „Welle an einem Potentialtopf“)

5 Formalismus der Quantenmechanik

5.1 Unschärferelation

(Abb Q44)

Dazu: Operator $\hat{O}$

Unschärfe (zum Quadrat):

$$(\Delta O)^2 = \left\langle \left(\hat{O} - \left\langle \hat{O} \right\rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle \hat{O}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{O} \right\rangle^2$$

Betrachte zwei <u>hermitesche</u> Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \left\langle \left(\hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle\right)^2 \right\rangle \\ (\Delta B)^2 &= \left\langle \left(\hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle\right)^2 \right\rangle \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|}{2}}$$

Verallgemeinerte Unschärferealtion

z.B. $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$, $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

$\Rightarrow \Delta x \Delta p_x \geq \frac{|i\hbar|}{2} = \frac{\hbar}{2}$

Beweis $\hat{a} = \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle$, $\hat{b} = \hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle \Rightarrow \hat{a} = \hat{a}^+$, $\hat{b} = \hat{b}^+$ da $\hat{A} = \hat{A}^+$, $\hat{B} = \hat{B}^+$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \left\langle \hat{a}^2 \right\rangle \\ &= \int \overset{\star}{\psi}(\vec{r}, t)\, \hat{a}^2 \psi(\vec{r}, t)\, d^3r \\ &= \int \overset{\star}{\psi}(\vec{r}, t)\, \hat{a}\hat{a}\psi(\vec{r}, t)\, d^3r \\ \text{mit} \quad & \hat{a} = \hat{a}^+ \\ &= \int \left(\hat{a}\psi(\vec{r}, t)\right)^\star \hat{a}\psi(\vec{r}, t)\, d^3r \\ &= \int \left|\hat{a}\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r \\ (\Delta B)^2 &= \int \left|\hat{b}\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r \end{aligned}$$

Betrachte:

$$F(\lambda) = \int \left|\left(\hat{a} + i\lambda\hat{b}\right)\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r \geq 0$$

λ: reell

Ausmultiplizieren

$$\begin{aligned}
\int \left(\left(\hat{a}+i\lambda\hat{b}\right)\psi\right)^{\star}\left(\hat{a}+i\hat{b}\right)\psi d^3r &= \int \left((\hat{a}\psi)^{\star}-i\lambda\left(\hat{b}\psi\right)^{\star}\right)\left(\hat{a}\psi+i\lambda\hat{b}\psi\right)d^3r \\
&= \int \overset{\star}{\psi}\left(\hat{a}-i\lambda\hat{b}\right)\left(\hat{a}+i\lambda\hat{b}\right)\psi d^3r \\
&= \int \overset{\star}{\psi}\left(\hat{a}^2+\lambda^2\hat{b}^2+i\lambda\underbrace{\left(\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a}\right)}_{[\hat{a},\hat{b}]}\psi\right)d^3r \\
&= \left\langle\hat{a}^2\right\rangle+\lambda^2\left\langle\hat{b}^2\right\rangle+i\lambda\left\langle\left[\hat{a},\hat{b}\right]\right\rangle \geq 0
\end{aligned}$$

Es gilt $\left[\hat{a},\hat{b}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, $i\left[\hat{a},\hat{b}\right] =: c$ (hermitesch)

Wähle speziell $\lambda=\lambda_0$ mit $\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}\Big|_{\lambda=\lambda_0}=0$

$$\begin{aligned}
\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}\Big|_{\lambda_0} &= 2\lambda_0\left\langle\hat{b}^2\right\rangle+\underbrace{\left\langle i\left[\hat{a},\hat{b}\right]\right\rangle}_{\hat{c}}=0 \\
\Rightarrow \lambda_0 &= -\frac{\langle\hat{c}\rangle}{2\left\langle\hat{b}^2\right\rangle}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F(\lambda_0) &= \left\langle\hat{a}^2\right\rangle+\left(\frac{\langle\hat{c}\rangle^2}{4\left(\left\langle\hat{b}^2\right\rangle\right)^2}\right)\left\langle\hat{b}^2\right\rangle+\left(-\frac{\langle\hat{c}\rangle}{2\left\langle\hat{b}^2\right\rangle}\right)\langle\hat{c}\rangle \\
&= \left\langle\hat{a}^2\right\rangle-\frac{1}{4}\frac{\langle\hat{c}\rangle^2}{\left\langle\hat{b}^2\right\rangle}\geq 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle\hat{a}^2\right\rangle\left\langle\hat{b}^2\right\rangle &\geq \frac{1}{4}\langle\hat{c}\rangle^2 \\
\langle\Delta A\rangle^2(\Delta B)^2 &\geq \frac{1}{4}\langle\hat{c}\rangle^2 \\
\Delta A\Delta B &\geq \frac{1}{2}\left|\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|
\end{aligned}$$

da $\hat{c}=i\left[\hat{A},\hat{B}\right]$

Folgerungen

1. $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0 \Rightarrow \Delta A\cdot\Delta B\geq 0$
2. $\hat{A}=\hat{\vec{r}}$, $\hat{B}=\hat{\vec{p}}$
   $\boxed{[\hat{r}_j,\hat{p}_{j'}]=i\hbar\delta_{j,j'}}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\Delta r_j\cdot\Delta p_{j'}\geq\frac{\hbar}{2}\delta_{j,j'}}$ Heisenberg'sche Unschärferalation
   z.B. $\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\frac{\hbar}{2}$, $\Delta y\cdot\Delta p_x\geq 0$
   $\boxed{\text{In einer Raumrichtung können Ort und Impuls nicht gleichzeitig genau bekannt sein}}$
   Beispiel: „klassisches Teilchen“
   $m=10^{-6}\text{g}=10^{-9}\text{kg}$
   $\Delta x=1\text{Å}=10^{-10}\text{m}$
   $\Rightarrow \Delta v_x\geq 0{,}5\cdot 10^7\,\frac{\text{m}}{\text{s}}$
   $\rightarrow$ extrem große Unschärfe

3. „Energie-Zeit-Unschärfe"
   Energie $\Leftrightarrow$ Hamiltonoperator $\hat{H}$
   Zeit: spielt in der Quantenmechanik eine andere Rolle als z.B. Ort oder Geschwindigkeit. „Es gibt keinen Zeitoperator"
   Betrachte Operator $\hat{A}$. ($\hat{A}$ soll nicht explizit von t abhängen)

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\hat{H},\hat{A}\right]\right\rangle + \underbrace{\left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle}_{=0}$$

   Aus Unschärferelation

$$\Delta H \cdot \Delta A \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{H},\hat{A}\right]\right\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\frac{\hbar}{i}\frac{d\left\langle \hat{A}\right\rangle}{dt}\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\left\langle \hat{A}\right\rangle}{dt}\right|$$

$$\Delta H = \sqrt{\left\langle \left(\hat{H} - \left\langle \hat{H}\right\rangle\right)^2\right\rangle}$$

   „Unschärfe der Energie": ΔE

$$\Delta E \cdot \frac{\Delta A}{\left|\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt}\right|} \geq \frac{\hbar}{2}$$

   $\frac{\Delta A}{\left|\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt}\right|}$ hat die Dimension einer Zeit $\hat{=}\Delta t$
   $\Delta \hat{t} \hat{=}$Zeitintervall in dem sich $\left\langle \hat{A}\right\rangle$ um ΔA verändert
   $\Rightarrow$

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$ „Energie-Zeit-Unschärfe"

   mit

$$\boxed{\Delta t = \frac{\Delta A}{\left|\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt}\right|}}$$

5.2 Kommutierende Operatoren

$$\hat{A}\varphi_n(\vec{r}) = a_n\varphi_n(\vec{r})$$

Eigenzustandsgleichung

$\hat{A} = \hat{A}^+$ hermitesch

Zunächst $\hat{B}$ sei hermitescher Operator, der auch $\varphi_n(\vec{r})$ als Eigenfunktionen besitzt:

$$\hat{B}\varphi_n(\vec{r}) = b_n\varphi_n(\vec{r})$$

Es gilt:

Zwei hermitsche Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$, die gemeinsame Eigenfunktionen besitzen, vertauschen miteinander

Denn

$$f(\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$$

c_n: Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned}
\left[\hat{A}, \hat{B}\right] f(\vec{r}) &= \sum_n c_n \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) \varphi_n(\vec{r}) \\
&= \sum_n c_n \left(\hat{A} b_n - \hat{B} a_n\right) \varphi_n(\vec{r}) \\
&= \sum_n c_n \underbrace{(a_n b_n - b_n a_n)}_{=0} \varphi_n(\vec{r}) = 0
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$

Umkehrung $\boxed{\text{Zwei hermitesche Operatoren } \hat{A} \text{ und } \hat{B}\text{, die miteinander vertauschen, besitzen ein System von gemeinsamen Eigenfunktionen}}$

$\rightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \Rightarrow \hat{A}\varphi_n(x) = a_n \varphi_n(x),\ \hat{B}\varphi_n(x) = b_n \varphi_n(x)$

Denn Starte von

$$\hat{A}\varphi_n(x) = a_n \varphi_n(x) \tag{34}$$

und

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \tag{35}$$

$$\begin{aligned}
\hat{A}\underline{\hat{B}\varphi_n(x)} &\overset{(35)}{=} \hat{B}\hat{A}\varphi_n(x) \\
&\overset{(35)}{=} \hat{B} a_n \varphi_n(x) \\
&= a_n \underline{\hat{B}\varphi_n(x)}
\end{aligned}$$

Fall: keine Entartung zu a_n ehört eine Eigenfunktion φ_n, die bis auf multiplikativen Faktor eindeutig ist $\Rightarrow \hat{B}\varphi_n(x) = \underbrace{b_n}_{\text{Faktor}} \varphi_n(x) \Rightarrow \varphi_n(x)$ ist auf Eigenfunktion von $\hat{B}$

Fall: Entartung

$$\hat{A}\varphi_n^{(j)}(x) = a_n \varphi_n^{(j)}(x)$$

$j = 1, 2, ..., g \mathrel{\hat{=}} g$-fache Entartung des Eigenwertes a_n

Idee Man bildet Linearkombinationen der g entarteten Zustände

$$\chi_n^{(s)}(x) = \sum_{j=1}^{g} c_{j,s,n} \varphi_n^{(j)}(x)$$

$s = 1, 2, ..., g$

Man kann die Koeffizienten $c_{j,s,n}$ so wählen, dass $\chi_n^{(s)}(x)$ Eigenfunktionen von $\hat{B}$ sind. Beweis siehe z.B. Merbacher „Quantum Mechanics“

5.3 Parität

Harmonischer Oszillator, Potentialtopf (gebundene Zustände)

$\rightarrow$ Zustände sind gerade bzw. ungerade

(Abb Q45)

Potential: $V(x) = V(-x)$

Vermutung: Symmetrie des Potentials ist verantwortlich für das Auftreten von geraden, bzw. ungeraden Zuständen

Dazu Definiere Operator $\hat{\Pi}$ (Paritätsoperator)

$$\hat{\Pi} f(x) = f(-x)$$

(bzw. $\hat{\Pi} f(\vec{r}) = f(-\vec{r})$ im Dreidimensionalen)

Hamiltonoperator:

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

$\Rightarrow \hat{\Pi}\hat{H} = \hat{H}\hat{\Pi} \Rightarrow \left[\hat{H}, \hat{\Pi}\right] = 0$

$\underset{5.2}{\Rightarrow}$ es gibt gemeinsame Eigenfunktionen

Eigenfunktionen von $\hat{\Pi}$

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}\varphi_n(x) &= \lambda_n \varphi_n(x) && (36) \\
\hat{\Pi}\varphi_n(x) &= \varphi_n(-x) && (37) \\
\hat{\Pi}^2\varphi_n(x) &= \hat{\Pi}\hat{\Pi}\varphi_n(x) \\
&\overset{(36)}{=} \hat{\Pi}\lambda_n\varphi_n(x) \\
&\overset{(36)}{=} \lambda_n^2\varphi_n(x) && (38) \\
\hat{\Pi}^2\varphi_n(x) &\overset{(37)}{=} \hat{\Pi}\varphi_n(-x) && (39) \\
&\overset{(37)}{=} \varphi_n(x) && (40)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_n^2\varphi_n(x) = \varphi_n(x)$$

$\Rightarrow$

$$\varphi_n^2 = 1$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda_n = \pm 1}$$

$\lambda_n = +1$

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}\varphi_n(x) &\overset{(36)}{=} 1\varphi_n(x) \\ \hat{\Pi}\varphi_n(x) &\overset{(37)}{=} \varphi_n(-x) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\varphi_n(x) = \varphi_n(-x)$$

$\hat{=}$ gerade Funktion

$\lambda_n = -1$

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}\varphi_n(x) &\overset{(36)}{=} -1\varphi_n(x) \\ \hat{\Pi}\varphi_n(x) &\overset{(37)}{=} \varphi_n(-x) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} -\varphi_n(x) &= \varphi_n(-x) \\ \Rightarrow \varphi_n(x) &= -\varphi_n(-x) \end{aligned}$$

$\hat{=}$ ungerade Funktion

$\left[\hat{\Pi}, \hat{H}\right] = 0 \Rightarrow \hat{H}$ besitzt auch gerade bzw. ungerade Eigenfunktionen

Eigenzustände lassen sich nach der Symmetrieeigenschaften des Potentials klassifizieren

z.B.

- Potential mit Spiegelsymmetrie $V(x) = V(-x) \to \hat{\Pi}$ Paritätsoperator
- Potential mit „Drehsymmetrie“ $V(\vec{r}) = V\left(\underbrace{\overline{D}}_{\text{Drehmatrix}} \vec{r}\right)$, $\hat{R}_{\overline{D}}$:Drehoperator, $\hat{R}_{\overline{D}} f(\vec{r}) = f\left(\overline{D}\vec{r}\right)$
- Atome: kontinuierliche Drehungen (alle Winkel)
- Molekül: endliche Drehungen (nur für bestimmte Winkel bleibt $V(\vec{r})$ unverändert)
- Periodische Potentiale $V(\vec{r}) = V\left(\vec{r} + \underbrace{\vec{t}}_{\text{Verschiebung um } \vec{t}}\right)$, $\hat{T}_{\vec{t}}$ Translationsoperator, $\hat{T}_{\vec{t}} f(\vec{r}) = f\left(\vec{r} + \vec{t}\right)$

5.4 Dirac-Notation

Bisher: quantenmechanische Zustände als Wellenfunktion

Ortsdarstellung: $\psi(\vec{r}, t)$

Impulsdarstellung: $\phi(\vec{p}, t)$

Notation nach Dirac Skalarprodukt

$$\begin{aligned} (\chi, \psi) &= \int \overset{\star}{\chi} (\vec{r}, t)\, \psi (\vec{r}, t)\, d^3 r \\ &= < \chi | \psi > \end{aligned}$$

bracket (englisch: Klammer)

$|\psi >$ quantenmechanischer Zustand „ket“-Vektor ($\hat{=}$ abstrakte Darstellung der Wellenfunktion $\psi (\vec{r}, t)$)

$\curvearrowright \psi (\vec{r}, t)$ ist Orstdarstellung von $|\psi >$

$< \chi|$ quantenmechanischer Zustand im dualen Raum „bra“-Vektor

Erwartungswert des Operator $\hat{O}$

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle =< \psi | \hat{O} | \psi >= \int \overset{\star}{\psi} (\vec{r}, t)\, \hat{O} \psi (\vec{r}, t)\, d^3 r$$

<u>Allgemein</u>

$$< \chi | \hat{O} | \psi >= \int \overset{\star}{\chi} (\vec{r}, t)\, \hat{O} \psi (\vec{r}, t)\, d^3 r$$

Eigenschaften: (folgen direkt aus Definition)

$$\begin{aligned} < \chi | \varphi > &= < \varphi | \chi >^\star & (41) \\ < \chi | \hat{O} | \varphi > &= < \chi | \hat{O} \varphi >=< \hat{O}^+ \chi | \varphi > & (42) \\ < \chi | (\varphi + \phi) > &= < \chi | \varphi > + < \chi | \phi > & (43) \\ < \chi | c \cdot \psi > &= c < \chi | \varphi > \quad c \in \mathbb{C} & (44) \\ < c \cdot \chi | \varphi > &= c^\star < \chi | \varphi > \quad c \in \mathbb{C} & (45) \end{aligned}$$

Eigenwertgleichung

$$\hat{O} | \varphi_n >= \lambda | \varphi_n >$$

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

$$< \varphi_n | \varphi_{n'} >= \delta_{n,n'} \quad \text{Orthogonalität}$$

Entwicklung Ortsdarstellung

$$f (\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n (\vec{r})$$

Dirac-Notation

$$|f >= \sum_n c_n | \varphi_n > \quad | \cdot < \varphi_{n'} |$$

$\Rightarrow$

$$< \varphi_{n'} | f >= \sum_n c_n \underbrace{< \varphi_{n'} | \varphi_n >}_{\delta_{n,n'}} = c_{n'}$$

$\Rightarrow$

$$c_n =< \varphi_n | f > \tag{46}$$

<u>Damit</u>:

$$|f >= \sum_n | \varphi_n > c_n \overset{(46)}{=} \sum_n | \varphi_n >< \varphi_n | f >$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\sum_n |\varphi_n><\varphi_n| = \hat{1}}$$

„Vollständige Eins“

Projektionsoperator

$$\hat{P}_n = |\varphi_n><\varphi_n|$$

Ortsraumdarstellung

$$\psi\left(\vec{r},t\right) := <\vec{r}|\psi>$$

$|\vec{r}>$: Eigenzustände des Ortsraumoperators $\hat{\vec{r}}$

$<\vec{r}|\vec{r}'>=\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)$ Orthogonalität

$$<\vec{r}|\vec{r}>=<\vec{r}|\hat{1}|\vec{r}'>=\sum_n \underbrace{<\vec{r}|\varphi_n>}_{\varphi_n(\vec{r})}\underbrace{<\varphi_n|\vec{r}'>}_{\varphi_n^\star(\vec{r}')}=\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\sum_n \varphi_n\left(\vec{r}\right)\varphi_n^\star\left(\vec{r}'\right)=\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)}$$

$\hat{=}$ vollständiger Eins

Bemerkung: Die Zustände $|\psi>$ sind mathematisch gesehen Elemente eines komplexen, linearen und vollständigen Vektorraums. Ein solcher Raum wird als Hilbert-Raum bezeichnet.

QM	Lineare Algebra (in drei Dimmensionen)
Zustand $\quad |\psi>$ „bra“	Vektor $\quad \vec{a}=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$
$<\chi|$ „ket“	$\vec{b}^T=\begin{pmatrix}b_1 & b_2 & b_3\end{pmatrix}$
Skalarprodukt	
$<\chi|\varphi>$	$\vec{b}^T\cdot a=\sum_{n=1}^{3} b_i a_i$
Operator $\quad \hat{O}$	Matrix $\quad \overline{M}=\begin{pmatrix}M_{11} & M_{12} & M_{13}\\ & \ddots & \vdots\\ & & M_{33}\end{pmatrix}$
$\hat{O}|\varphi_n>=\lambda_n|\varphi_n>$ gilt für $\hat{O}=\hat{O}^+$	$\overline{M}\vec{d}^{(n)}=\lambda_n\vec{d}^{(n)}$, $n=1,2,3$ gilt für $\overline{M}=\overline{M}^+=\left(\overline{M}^T\right)^\star$ (hermitesche Matrix)
$<\varphi_n|\varphi_{n'}>=\delta_{n,n'}$	$\vec{d}^{(n)T}\cdot\vec{d}^{(n')}=\delta_{n,n'}$
$\sum_n|\varphi_n><\varphi_n|=\hat{1}$	$\sum_n d_i^{(n)}d_j^{(n)}=\delta_{i,j}$
$|f>=\sum_n c_n|f>$	$\vec{a}=\sum_{n=1}^{3} c_n\vec{d}^{(n)}$

Vergleich zwischen Quantenmechanik und linearer Algebra

6 Operatormethode zur Behandlung des harmonischen Oszilators

6.1 Eigenwerte

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

mit $\hat{p} = \hat{p}_x$, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\right)$$

1. Schritt Faktorisurng (Idee von Schrödinger)

Dazu

$$\begin{aligned}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right) &= \left(\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} - \frac{i}{m\omega}\underbrace{(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})}_{=[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar}\right) \\ &= \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} + \frac{\hbar}{m\omega}\end{aligned}$$

bzw.

$$\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right) = \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} - \frac{\hbar}{m\omega}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}m\omega^2\left(\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right) + \frac{\hbar}{\omega}\right) \\ \hat{H} &= \hbar\omega\left(\frac{m\omega}{\hbar^2}\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right) + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

Definition

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{2m}\right)$$

Adjungierter Operator

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)}$$

Suche: $\hat{H}|\varphi_n >= E_n|\varphi_n >$ also $\hat{a}^+\hat{a}|\varphi_n >= \lambda_n|\varphi_n >$ mit $\boxed{E_n = \hbar\omega\left(\lambda_n + \frac{1}{2}\right)}$

Ziel: Berechnung der Eigenwerte von $\hat{a}^+\hat{a} = \hat{N}$

Dazu

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{a},\hat{a}^{+}\right] &= \hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a} = ? \\
&= \left[\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega},\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right]\frac{m\omega}{2\hbar} \\
&= \frac{i}{m\omega}\left(\underbrace{[\hat{p},\hat{x}]}_{-i\hbar}-\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar}\right)\frac{m\omega}{2\hbar} \\
&= \frac{i}{m\omega}\left(2\left(-i\right)\hbar\right)\frac{m\omega}{2\hbar}=1
\end{aligned}
$$

$$
\left[\hat{a},\hat{a}^{+}\right]=1 \tag{47}
$$

2. Schritt Lösung der Eigenwertgleichung

$$
\hat{a}^{+}\hat{a}|\varphi_n>=\lambda_n|\varphi_n> \tag{48}
$$

1. Die Eigenwerte λ_n haben die Eigenschaft $\lambda_n \geq 0$
   Denn:

$$
\begin{aligned}
<\varphi_n|\hat{a}^{+}\hat{a}|\varphi_n> &= <\left(\hat{a}^{+}\right)^{+}\varphi_n|\hat{a}\varphi_n> \\
&= <\hat{a}\varphi_n|\hat{a}\varphi_n>
\end{aligned}
$$

$$
\int\left(\hat{a}\varphi_n\left(x\right)\right)^{\star}\left(\hat{a}\varphi_n\left(x\right)\right)dx = \int\left|\hat{a}\varphi_n\left(x\right)\right|^2 dx \geq 0
$$

$$
<\varphi_n|\hat{a}^{+}\hat{a}|\varphi_n>\overset{(48)}{=}<\varphi_n|\lambda_n|\varphi_n>=\lambda_n\underbrace{<\varphi_n|\varphi_n>}_{1}=\lambda_n
$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\lambda_n \geq 1}$

$$
\lambda_n=<\varphi_n|\hat{a}^{+}\hat{a}|\varphi_n>\geq 0 \tag{49}
$$

2. Falls $|\varphi_n>$ ein Eigenzustand von $\hat{a}^{+}\hat{a}$ ist, so ist $\hat{a}|\varphi_n>$ auch Eigenwert von $\hat{a}^{+}\hat{a}$
   Dazu:

$$
\begin{aligned}
\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}|\varphi_n> &\overset{(47)}{=} \left(\hat{a}\hat{a}^{+}-1\right)\hat{a}|\varphi_n> \\
&= \left(\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a}-\hat{a}\right)|\varphi_n \\
&= \hat{a}\left(\hat{a}^{+}\hat{a}-1\right)|\varphi_n> \\
&\overset{(48)}{=} \hat{a}\left(\lambda_n-1\right)|\varphi_n> \\
&= \left(\lambda_n-1\right)\hat{a}|\varphi_n>
\end{aligned}
$$

   $\Rightarrow$ $\hat{a}|\varphi_n>$ ist Eigenwert von $\hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}$ mit Eigenwert λ_n-1
   Analog $\hat{a}^{+}|\varphi_n>$ ist Eigenwert von $\hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}$ mit Eigenwert λ_n+1

3. „Leiter“ von Zuständen
   (Abb Q46)
   $\Rightarrow$

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\lambda_{n+1} &= \lambda_n+1 \\
\lambda_{n-1} &= \lambda_n-1
\end{aligned}
}
$$

$$
\left.
\begin{array}{cc}
\hat{a}^{+} & \text{Aufsteigeoperator} \\
\hat{a} & \text{Absteigeoperator}
\end{array}
\right\}\text{„Leiteroperatoren”}
$$

Da $\lambda_n \geq 0$ kleinster Eigenwert λ_0 $(n = 0)$. Daher:

$$\boxed{\hat{a}|\lambda_0 >= 0}$$

da λ_0 kleinster Wert ist.

$\Rightarrow$

$$\hat{a}^+\hat{a}|\varphi_0 > \stackrel{(48)}{=} \lambda_0|\varphi_0 >$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_0|\varphi_0 >= 0$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_0 = 0$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_1 = 1,\, \lambda_2 = 2,\, \lambda_n = n$$

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

Eigenwertspektrum des harmonischen Oszillators

4. $\hat{a}|\underbrace{\varphi_n}_{\text{normiert}} >= \underbrace{c}_{\text{Normierungsfaktor}} |\underbrace{\varphi_{n-1}}_{\text{normiert}} >, < \varphi_n|\varphi_{n'} >= \delta_{n,n'}$

   Da

$$\begin{aligned} \lambda_n &\stackrel{(48)}{=} < \hat{a}\lambda_n|\hat{a}\lambda_n > \\ &= c^\star c \underbrace{< \varphi_{n-1}|\lambda_{n-1} >}_{=1} = |c|^2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$c = \sqrt{\lambda_n} = \sqrt{n} \quad \text{(bis auf Phasenfaktor)}$$

Analog

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{a}|\varphi_n > &= \sqrt{n}|\varphi_{n-1} > \\ \hat{a}^+|\varphi_n > &= \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1} > \end{aligned}}$$

$n = 0$:

$$\hat{a}^+|\varphi_0 >= \sqrt{1}|\varphi_1 >$$

$n = 1$:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+|\varphi_1 > &= \sqrt{2}|\varphi_2 > \\ \Rightarrow \quad |\varphi_2 > &= \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{2}}|\varphi_1 >= \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2}}|\varphi_0 > \end{aligned}$$

$n = 2$:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+|\varphi_2 > &= \sqrt{3}|\varphi_3 > \\ \Rightarrow \quad |\varphi_3 > &= \frac{(\hat{a}^+)^3}{\sqrt{3 \cdot 2}}|\varphi_0 > \end{aligned}$$

Allgemein
$$\boxed{|\varphi_n>=\frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0>}$$

Berechnung von $\varphi_0(x)$ Abbruchbedingung:

$$\hat{a}|\varphi_0>=0$$

Ortsdarstellung $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, $\hat{x}=x$

$$\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x)=0$$

$\Rightarrow$ Differentialgleichung für $\varphi_0(x)$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\varphi_0(x)=-x\varphi_0(x)$$

Ansatz

$$\begin{aligned}\varphi_0(x) &= e^{-\beta\cdot x^2}\\ \frac{d}{dx}\varphi_0(x) &= -2\beta x e^{-\beta x^2} \qquad \Rightarrow \beta=\frac{m\omega}{2\hbar}\\ \frac{\hbar}{m\omega}(-2\beta x)e^{-\beta x^2} &= -xe^{-\beta x^2}\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\varphi_0(x)=e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

(bis auf Faktor)

Normierung
$$\boxed{\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

Alle anderen Zustände
$$\boxed{\varphi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

$$\begin{aligned}\alpha &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\\ \varphi_n(x) &= \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\cdot\frac{1}{\sqrt{n!\cdot 2^n}}}_{=A_n}\left(\alpha x-\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{\alpha^2}{2}x^2}\\ y &= \alpha x\\ \varphi_n\left(\frac{y}{\alpha}\right) &= A_n\left(y-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}\end{aligned}$$

Was liefert $\left(y-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}$?

Dazu

$$\begin{aligned}\left(y-\frac{d}{dy}\right)e^{\frac{y^2}{2}}f(y) &= \underbrace{ye^{\frac{y^2}{2}}f(y)-\frac{2y}{2}e^{\frac{y^2}{2}}f(y)}_{=0}-e^{\frac{y^2}{2}}\frac{d}{dy}f(y)\\ \Rightarrow\quad \left(y-\frac{d}{dy}\right)^n e^{\frac{y^2}{2}}f(y) &= (-1)^n e^{\frac{y^2}{2}}\frac{d^n}{dy^n}f(y)\end{aligned}$$

Speziell $f(y)=e^{-y^2}$

$$\begin{aligned}\left(y-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}} &= (-1)^n e^{\frac{y^2}{2}}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2}\\ &= e^{-\frac{y^n}{2}}\quad \underbrace{(-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2}}_{H_n(y)\ n\text{-tes Hermite-Polynom}}\end{aligned}$$

($H_n(y)$ wie in (24) auf Seite 42 in Rodriques-Darstellung)

$\Rightarrow$

$$\boxed{\varphi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!2^n}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}}$$

7 Bewegung in einem Zentralfeld

Potential $V(\vec{r})=V(|\vec{r}|)=V(r)$

Feld $\vec{F}(\vec{r})=-\mathrm{grad}V(\vec{r})=f(r)\,\vec{r}$

Speziell Coulomb-Potential $V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$

7.1 Drehimpulsoperator

7.1.1 Vorbemerkung: Drehimpuls in klassischer Physik

Klassische Physik: Energiesatz bei kugelsymmetrischem Potential

$$\begin{aligned}E &= \frac{1}{2}mv^2+V(r)\\ \vec{v} &= \frac{d}{dt}\vec{r}\\ \dot{r} &= \frac{d}{dt}|\vec{r}|\quad(\text{„Radialgeschwindigkeit”})\end{aligned}$$

liefert

$$\begin{aligned}E &= \underbrace{\frac{1}{2}m\dot{r}^2}_{=\frac{p_r^2}{2m}}+\underbrace{\frac{L^2}{2mr^2}+V(r)}_{\text{effektives Potential}}\\ &= \frac{p_r^2}{2m}+\frac{L^2}{2mr^2}+V(r)\\ &= \underbrace{H}_{\text{Hamilton-Funktion}}\end{aligned}$$

$p_r=m\dot{r}$: „Radialimpuls“

7.1.2 Drehimpuls in Quantenmechanik

Definition

$$\boxed{\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \underset{\text{Ortsdarstellung}}{=} \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}}$$

$\vec{L} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}$, es gilt: $\vec{L} = \vec{L}^+$ d.h. Drehimpuls ist ein hermitscher Operator

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

Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= \left[\hat{L}_x, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right] \\
&= \left[\hat{L}_x, \hat{z}\hat{p}_x\right] - \left[\hat{L}_x, \hat{x}\hat{p}_z\right] \\
\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] &= \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] \\
\left[\hat{L}_x, \hat{z}\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\right] \\
&= \hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{z}\right] \\
&= -i\hbar\hat{y} \\
\left[\hat{L}_x, \hat{p}_x\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x\right] \\
&= 0 \\
\Rightarrow \quad \left[\hat{L}_x, \hat{z}\hat{p}_x\right] &= -\hbar\hat{y}\hat{p_x} \\
\left[\hat{L}_x, \hat{x}\right] &= 0 \\
\left[\hat{L}_x, \hat{p}_z\right] &= -i\hbar\hat{p}_y \\
\Rightarrow \quad \left[\hat{L}_x, \hat{x}\hat{p}_z\right] &= -i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\
\Rightarrow \quad \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= -\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z}$$

Analog

$$\boxed{\begin{aligned}
\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] &= i\hbar\hat{L}_x \\
\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] &= i\hbar\hat{L}_y
\end{aligned}}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_x\right] = 0 = \left[\hat{L}_y, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{L}_z\right]$$

Die verschiedenen Komponeneten von $\hat{\vec{L}}$ vertauschen <u>nicht</u> miteinander
→ $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ besitzen keine gemeinsamen Eigenfunktionen
→ $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ sind nicht gleichzeitig genau messbar

Operator $\hat{\vec{L}}^2$ (in klassischer Hamiltonfunktion tritt $\vec{L}^2$ auf)

$$\hat{\vec{L}}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Vertauschung $\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x\right] = ?$ Dazu:

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x\right] &= 0 \\
\left[\hat{L}_y^2 . \hat{L}_x\right] &= \left[\hat{L}_y \hat{L}_y, \hat{L}_x\right] \\
&= \hat{L}_y \underbrace{\left[\hat{L}_y, \hat{L}_x\right]}_{-i\hbar\hat{L}_z} + \underbrace{\left[\hat{L}_y \hat{L}_x\right]}_{-i\hbar\hat{L}_z} \hat{L}_y \\
&= -\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y \\
\left[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x\right] &= \left[\hat{L}_z \hat{L}_z, \hat{L}_x\right] \\
&= i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$
\left[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x\right] = 0
$$

$\Rightarrow$ $\hat{L}^2$ vertauscht mit $\hat{L}_x$

Analog: $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0$, $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$

$\Rightarrow$

$\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ (bzw. $\hat{L}_x$ oder $\hat{L}_y$) haben ein System von gemeinsamen Eigenfunktionen

Es wird sich zeigen, dass $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ mit $\hat{H}$ vertauschen $\rightarrow$ $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ haben gemeinsame Eigenfunktionen

7.1.3 Hamiltonoperator für kugelsymmetrisches Potential

Kugelkoordinaten (Abb Q47)

$$
\vec{r} = \begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{pmatrix}
$$

Einheitsvektoren $g_j \hat{=} r, \theta, \varphi$

$$
\vec{e}_{g_j} = \frac{\frac{\partial\vec{r}}{\partial g_j}}{\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial g_j}\right|}
$$

$$
\begin{aligned}
\vec{e}_r &= \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \\
\vec{e}_\theta &= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi \\ \cos\theta\sin\varphi \\ -\sin\theta \end{pmatrix} \\
\vec{e}_\varphi &= \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$\vec{e}_r$, $\vec{e}_\theta$, $\vec{e}_\varphi$ bilden Rechtssystem

Gradient

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L} &= \left(\hat{r} \times \vec{\nabla}\right) \\
&= \frac{\hbar}{i} r \left(\vec{e}_r \times \vec{\nabla}\right) \\
&= \frac{\hbar}{i} r \left(0 + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\vartheta \frac{\frac{\partial}{\partial\varphi}}{r\sin\theta}\right)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}$$

$$\hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\left(\begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial\theta} - \begin{pmatrix} \cot\theta\cos\varphi \\ \cot\theta\sin\varphi \\ -1 \end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

z-Komponente des Drehimpulsoperatpors in Kugelkoordinaten

Drehimpuls

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
\Rightarrow \quad \hat{\vec{L}}^2 &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
\text{(siehe Übung)} \quad &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{2mr^2} + V(r)}$$

- $\hat{\vec{L}}$ hängt nur von θ und φ ab (nicht von r)
- $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = \hat{p}_r\hat{p}_r$ radialer Impuls $\hat{p}_r$
  $\Rightarrow$

  $$\boxed{\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)}$$

  Denn:

$$\begin{aligned}
\hat{p}_r\hat{p}_r f(\vec{r}) &= -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}f\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}f - \frac{1}{r^2}f + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}f\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) f
\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)}$$

$\hat{H}$ vertauscht mit $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$

$$\left[\hat{H}, \hat{L}^2\right] = \underbrace{\left[\hat{p}_r^2, \hat{L}\right]}_{0} \frac{1}{2m} + \underbrace{\left[\hat{L}^2, \hat{L}^2\right]}_{0} \frac{1}{2mr^2} + \underbrace{\left[\hat{L}^2, V(r)\right]}_{0} = 0$$

Da $\hat{p}_r$ nur von r abhängt, $\hat{L}^2$ nur von θ und φ abhängt und $V(r)$ nur von r abhängt.

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = 0$$

, da $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$\Rightarrow$

$\boxed{\hat{H},\ \hat{L}^2 \text{ und } \hat{L}_z \text{ besitzen daher gemeinsame Eigenfunktionen}}$

7.1.4 Eigenwerte des Drehimpulsoperators

$$\boxed{\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\theta, \varphi)}$$

$\hat{L}$ hat Dimension $\mathrm{m\,kg\,\frac{m}{s}}$, $\hbar$ hat ebenfalls diese Dimension $\Rightarrow$ stelle Eigenwert als Vielfaches von $\hbar^2$ dar

$$\boxed{\hat{L}_z Y(\theta, \varphi) = \hbar m Y(\theta, \varphi)}$$

λ, m: „Quantenzahlen“: $Y_{\lambda m}(\theta, \varphi)$

Dirac-Notation

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{L}^2 |Y_{\lambda m}> &= \hbar^2 \lambda |Y_{\lambda m}> \\ \hat{L}_z |Y_{\lambda m}> &= \hbar m |Y_{\lambda m}> \end{aligned}}$$

$$\begin{aligned} < Y_{\lambda m}|\hat{L}^2|Y_{\lambda m}> &\overset{(50)}{=} < Y_{\lambda m}|\hbar^2\lambda|Y_{\lambda m}> \\ &= \hbar^2\lambda \underbrace{< Y_{\lambda m}|Y_{\lambda m}>}_{=1} \\ &= \hbar^2\lambda \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} < Y_{\lambda m}|\hat{L}\hat{L}|Y_{\lambda m}> &= < \underbrace{\hat{L}^+}_{\hat{L}} Y_{\lambda m}|\hat{L} Y_{\lambda m}> \\ &= < \hat{L} Y_{\lambda m}|\hat{L} Y_{\lambda m}> \geq 0 \\ \Rightarrow \quad \lambda &\geq 0 \end{aligned}$$

Definition

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &:= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ \hat{L}_- &:= \hat{L}_x - i\hat{L}_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{L}_+\right)^+ &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hat{L}_- \\ \left(\hat{L}_-\right)^+ &= \hat{L}_+ \end{aligned}$$

Wichtige Eigenschaften

1.

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_z,\hat{L}_+\right] &= \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x+i\hat{L}_y\right]\\ &= \underbrace{\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]}_{i\hbar\hat{L}_y}+i\underbrace{\left[\hat{L}_z,\hat{L}_y\right]}_{-i\hbar\hat{L}_x}\\ &= \hbar\hat{L}_x+i\hbar\hat{L}_y\\ &= \hbar\left(\hat{L}_x+i\hat{L}_y\right)\\ \left[\hat{L}_z,\hat{L}_+\right] &= \hbar\hat{L}_+ \end{aligned} \tag{52}$$

2.

$$\left[\hat{L}_z,\hat{L}_-\right]=-i\hbar\hat{L}_- \tag{53}$$

3.

$$\left[\hat{L}_+,\hat{L}_-\right]=2\hbar\hat{L}_z \tag{54}$$

4.

$$\begin{aligned}\hat{L}_+\hat{L}_- &= \left(\hat{L}_x+i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_y-i\hat{L}_y\right)\\ &= \hat{L}_x^2+i\underbrace{\left(\hat{L}_y\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_y\right)}_{\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]=-i\hbar\hat{L}_z}+\hat{L}_y^2\\ &= \hat{L}^2-\hat{L}_z^2+\hbar\hat{L}_z \end{aligned} \tag{55}$$

5.

$$\hat{L}_-\hat{L}_+=\hat{L}^2-\hat{L}_z^2+\hbar\hat{L}_z \tag{56}$$

Aus diesen Relationen folgt

1. $\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>$ ist Eigenfunktion von $\hat{L}_z$ zum Eigenwert $\hbar\,(m+1)$

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\underline{\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>} &= \left(\hat{L}_+\hat{L}_z+\hbar\hat{L}_+\right)|Y_{\lambda m}>\\ &\overset{(51)}{=} \left(\hat{L}_+\hbar m+\hbar\hat{L}_+\right)|Y_{\lambda m}>\\ &= \underbrace{\hbar\,(m+1)}_{\text{Eigenwert}}\underline{\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>}\end{aligned}$$

2. $\hat{L}_-|Y_{\lambda m}>$ ist Eigenfunktion von $\hat{L}_z$ zum Eigenwert $\hbar\,(m-1)$
$\Rightarrow$

$$\hat{L}_z\hat{L}_-|Y_{\lambda m}>=\hbar\,(m-1)\,\hat{L}_-|Y_{\lambda m}>$$

(Abb Q48)
$\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$: Leiteroperatoren

3. Aus der Norm von $\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>$ folgt

$$\begin{aligned}<\hat{L}_+Y_{\lambda m}|\hat{L}_+Y_{\lambda m}> &\geq 0\\ &= <Y_{\lambda m}|\left(\hat{L}_+\right)^+\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>\\ &= <Y_{\lambda m}|\hat{L}_-\hat{L}_+|Y_{\lambda m}>\\ &\overset{(56)}{=} <Y_{\lambda m}|\hat{L}^2-\hat{L}_z-\hbar\hat{L}_z|Y_{\lambda m}>\\ &\overset{(50),(51)}{=} <Y_{\lambda m}|\hbar^2\lambda-(\hbar m)^2-\hbar\hbar m|Y_{\lambda m}>\\ &= \hbar^2\left(\lambda-m\,(m+1)\right)\\ &\geq 0\end{aligned} \tag{57}$$

$\Rightarrow$

$$\lambda \geq m\,(m+1)$$

4. Analog folgt aus der Norm von $\hat{L}_{-}|Y_{\lambda m}>$:

$$\lambda \geq m\,(m-1)$$

5. Aus 3. und 4. folgt
$\lambda \geq m\,(m+1) \geq m\,(m-1)$ für m positiv
$\lambda \geq m\,(m-1) \geq m\,(m+1)$ für m negativ
$\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda \geq |m|\,(|m|+1)}$$

$\Rightarrow$ Die möglichen Werte von $|m|$ sind durch λ <u>nach oben</u> beschränkt
$\Rightarrow$ Es gibt einen maximalen Wert von m: $m_{max} := l$
$\Rightarrow$

$$\boxed{\hat{L}_{+}|Y_{\lambda l}>= 0}$$

da Zustand mit $l+1$ nicht existiert
Nach (57) mit $m = l$

$$\begin{aligned} \hbar^2\,(\lambda - l\,(l+1)) &\geq 0 \\ &= <\hat{L}_{+}Y_{\lambda l}|\hat{L}_{+}Y_{\lambda l}> \\ &= 0 \end{aligned}$$

(Abbruchbedingung)
$\Rightarrow \lambda - l\,(l+1) = 0$
$\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda = l\,(l+1)}$$

Es gibt einen minimalen Wert von m: m_{min}

$$\boxed{\hat{L}_{-}|Y_{\lambda m_{min}}>= 0}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda = m_{min}\,(m_{min}-1)}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{m_{min} = -l}$$

$\Rightarrow$ m „läuft“ von $-l$ bis $+l$:

$$\underbrace{-l, -l+1, ..., l-1, l}_{\text{„Länge“: } 2l}$$

Da Schritte von m die „Länge“ Eins haben: $2l$ ist ganze Zahl
$\Rightarrow$ l ist halbzahlig oder ganzzahlig

$$\begin{aligned} l &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, ... \\ \lambda &= l\,(l+1) \\ \hat{L}^2|Y_{\lambda m}> &= \hbar^2 l\,(l+1)\,|Y_{\lambda m}> \end{aligned}$$

Konvention Man beschreibt die Zusände mit Hilfe der „Quantenzahl“ l

$$\boxed{\hat{L}^2|Y_{lm}>= \hbar^2 l\,(l+1)\,|Y_{lm}>}$$

(nicht $|Y_{l(l+1)m}>$)

$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

$$\hat{L}_z|Y_{lm}> = \hbar m|Y_{lm}>$$

mit $-l \leq m \leq l$

Bemerkung Leiteroperatoren

$$\hat{L}_+|Y_{lm}> = \underbrace{c_{lm}}_{\text{Normierungsfaktor}}|Y_{l\,m+1}>$$

$$\begin{aligned} <\hat{L}_+Y_{lm}|\hat{L}_+Y_{lm}> &= |c_{lm}|^2 \\ &\overset{(57)}{=} \hbar^2\left(\lambda - m\left(m+1\right)\right) \\ &= \hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m\left(m+1\right)\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+|Y_{lm}> &= \hbar\sqrt{l\left(l+1\right) - m\left(m+1\right)}|Y_{l\,m+1}> \\ &= \hbar\sqrt{\left(l-m\right)\left(l+m+1\right)}|Y_{l\,m+1}> \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_-|Y_{lm}> &= \hbar\sqrt{l\left(l+1\right) - m\left(m-1\right)}|Y_{l\,m-1}> \\ &= \hbar\sqrt{\left(l+m\right)\left(l-m+1\right)}|Y_{l\,m-1}> \end{aligned}$$