# Integrierter Kurs IV

## Theoretische Physik II Tom Folgmann

## 11. Mai 2023

[Das Passwort für die offiziellen Kursfolien ist "2023ik4".]

## Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung und Wellenfunktion	1		
	1.1	Die Heisenbergsche Unschärferelation	6		
	1.2	Die Schrödingergleichung für freie Teilchen	7		
	1.3	Allgemeine Form der Schrödingergleichung	9		
	1.4	Normierung und Erwartungswert	12		
	1.5	Wellenfunktion im Impulsraum	13		
	1.6	Operatoren	13		
	1.7	Der Kommutator	16		
	1.8	Heisenbergsche Unschärferelation (II)	18		
2 1		en von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung 2.0.1 Potentialbarrieren	<b>19</b> 21		
Einleitung					
Βε 	ei der	Auffassung kleinster Teilchen gab es Probleme mit dem Teilchenmodell.		25.04.2023 08:15	
	Stelle	e dieses Problem deutlich dar. Skizziere eine Lösung desselben.		(⊚1)	

## Schwarzkörperstrahlung

Jede sogenannte Mode mit der Frequenz  $\nu=c_0/\lambda$  des elektromagnetischen Feldes kann beliebige Energien enthalten, enthält jedoch nach dem  $\ddot{A}quipositionsprinzip$  im Mittel die Energie  $E=k_B\cdot T$ , bekannt als das Rayleigh-Jeans-Gesetz.

#### Photoeffekt

## Compton Effekt

 $[\rightarrow$  IK4 Exp. II]

## Welleneigenschaften der Materie

 $[\rightarrow IK4 Exp. II]$ 

## Doppelspaltexperiment mit Elektronen

 $[\rightarrow IK4 Exp. II]$ 

.....

- (\$\infty)2) \quad \text{Lies im Skript der } Experimentalphysik II die Inhalte der \text{Überschriften nach.}
- $( 2.2 ) \rightarrow$  Wie lautet die de Broglie Relation?
- (  $\otimes$  2.3)  $\rightarrow$  Kann man das Doppelspaltexperiment auch mit massiveren Teilchen oder Molekülen durchführen? Gibt es hierbei eine Grenze? Recherchiere den Beitrag zur Doppelspaltuntersuchung der  $Universit ilde{a}t ilde{k} ilde{k} ilde{k} ilde{k} ilde{k} ilde{k}$

.....

## Welle-Teilchen-Dualismus

Wir haben beobachtet:

- $\rightarrow$  elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen
- $\rightarrow\,$ materielle Teilchen verhalten sich wie Wellen

Als Ziel unserer folgenden Untersuchungen setzen wir eine einheitliche Theorie, welche sowohl die Wellen- als auch die Teilcheneigenschaften beschreibt.

## Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Wir wollen den folgenden Zusammenhang herstellen:

freies Teilchen	ebene Welle
Impuls $p \in \mathbb{R}^3$	Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$
Energie $E(p) = p^2/2m$	Kreisfrequenz $\omega(k) = \hbar k^2/2m = c_0$ .
	$    k  _2$
	Amplidute am Ort $r(t)$ mit $\psi(t, r(t)) =$
	Amplidute am Ort $r(t)$ mit $\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp(\hat{i}(\langle r(t), k \rangle - \omega \cdot t)) \rightarrow Wellen$
	funktion

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Teilchen- und Welleneigenschaften.

Es kommen nun die folgenden Fragen auf:

- $\rightarrow$  Wie hängen p und k zusammen?
- $\to$  Was ist die physikalische Bedeutung von  $\psi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ ?

Es stellt sich heraus, daß wir die erste Frage bereits mit der de Broglie Relation [ $\rightarrow$  IK4 Exp II] beantworten können:  $p(k) = \hbar \cdot k$ , wobei  $\hbar := h/(2\pi)$  mit  $h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{J s}$ . Für die Energie finden wir aus der Schwarzkörperstrahlung den Zusammenhang  $E(\omega) = \hbar \cdot \omega$  (Einstein/Planck) mit  $\omega = 2\pi \cdot \nu$ . In die Funktion  $\psi$  eingesetzt folgt

$$\psi(t,r(t)) = C \cdot \exp\Biggl(\frac{\mathring{\imath} \cdot (\langle p,r(t),-\rangle \, E(p) \cdot t)}{\hbar}\Biggr).$$

Für die Dispersion der Welle gilt

$$E(\omega) = \hbar \cdot \omega = \begin{cases} \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} & m > 0 \\ \hbar \cdot c_0 \cdot ||k||_2 & \text{sonst} \end{cases} = \begin{cases} \frac{\langle p, p \rangle}{2 \cdot m} & m > 0 \\ c_0 \cdot ||p||_2 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die physikalische Interpretation müssen wir uns der Wahrscheinlichkeitsinterpretation widmen:

Teilchen	Welle
Aufenthaltswahrscheinlichkeit	Intensität der Welle $ \psi(t, r(t)) ^2$
des Teilchens (pro Volumen) am	
Ort $r(t)$ zur Zeit $t \in \mathbb{R}$	

Prinzipiell ist es möglich, den Ort zum Zeitpunkt eines Teilchens zu kennen; anders ist es bei quantenmechanischen Wellen. Wir bemerken:

- $\rightarrow \psi$  bezeichnet man auch als Wahrscheinlichkeitsamplitude.
- $\rightarrow$  Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des durch r beschriebenen Teilchens ist gegeben als Integral

$$P(t,V) := \int |\psi(t,x)|^2 \lambda_V(dx) =: \mu(V)$$

mit Wahrscheinlichkeitsmaß  $P(t,\cdot) =: \mu$  auf  $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3))$ . Ist der Aufenthalt in einem Volumen  $V \subseteq \mathbb{R}^3$  bekannt, so sei

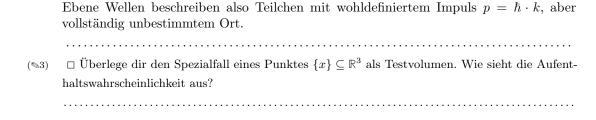
$$P(t, V) := \begin{cases} \int |\psi(t, x)|^2 \ \lambda_V(dx) & V \in \sigma(\mathbb{R}^3) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

eine Umdefinition des Maßes.

 $\rightarrow$  Aus der Wahrscheinlichkeitsmaß-Eigenschaft  $\mu(\mathbb{R}^3) = 1$  folgt

$$P(t, \mathbb{R}^3) = \int |\psi(t, x)|^2 \lambda_V(dx) = 1.$$

 $\to$  In einem Volumen  $W \subseteq V \subseteq \mathbb{R}^3$  gilt  $\mu|_V(W) = \lambda(V) \cdot |C|^2$  und für W = V folgt  $|C|^2 = 1/\lambda(V)$ .



## Wellenpakete

Als nächstes beschäftigen wir uns mit der Frage, wie wir Teilchen mit genau definiertem Aufenthaltsort beschreiben. Wir wenden uns hierbei an das Prinzip der Superposition, konkreter der Fourier-Summation, bei der wir eine Funktion  $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  zerlegen in Funktionen des Typus der ebenen Welle:

$$\psi(t,r(t)) = \frac{1}{(2\cdot\pi)^3} \int \left( \exp\biggl( \mathring{\imath} \cdot (\langle x,r(t)\rangle - \frac{\hbar \cdot x^2}{2\cdot m} \cdot t) \biggr) \right)_{x \in \mathbb{R}^3} \left( \mathbb{1}_V \cdot \tilde{\psi} \right) \quad V \subseteq \mathbb{R}^3,$$

wobei  $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3), \tilde{\psi})$  ein Maßraum ist. Wir haben dabei den Zusammenhang

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

 $\square$  Warum wird bei der Fourier-Summation keine Wurzel im Vorfaktor gezogen? Recherchiere verschiedene Konventionen. [Tipp: Bedenke  $\hbar = h/(2 \cdot \pi)$  und die Definition des Impulses über k.]

.....

# *VL 2* 27.04.2023, 10:00

( 4)

## Gaußsches Wellenpaket

Als fundamentale Funktion eines Wellenpaketes zählt das sogenannte  $Gau\beta$ sche Wellenpaket. Es wird beschrieben durch die Funktion

$$\psi(k) = A \cdot \exp\left(\frac{-(k-k_0)^2}{4 \cdot \pi^2}\right), \quad \psi \in \text{Abb}\left(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3\right),$$

wobei  $4\pi^2$  mit der "Breite" korreliert und  $k_0$  der *mittlere Wellenvektor* ist. Die Funktion hat die Form

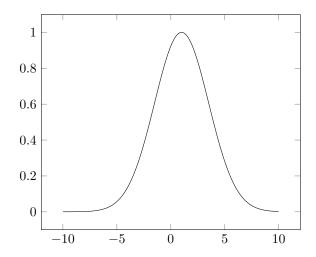


Abbildung 1: Die Gaußkurve für A = 1,  $k_0 = 1$  in  $\mathbb{R}$ .

Das Ergebnis der Fourier-Summation angewendet auf die Gaußfunktion ergibt

$$|\psi(t, r(t))|^2 = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot w(t)}^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{(r(t) - v \cdot t)^2}{2 \cdot w(t)^2}\right)$$

mit der Definition  $v:=\hbar\cdot k/m=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\omega(k_0+t\cdot h)]\right|_{t=0}=d\omega(k_0)(h)$  und  $w(t):=\sqrt{w(0)^2+((\hbar\cdot t)/(2\cdot w(0)\cdot m))}$  mit dem Startwert  $w(0)=1/(2\cdot \sigma)$ .

.....

- $\hfill\square$  Man spricht bei Fourier-Summationen vom Raumwechsel. Was ist damit gemeint? Welche  $\hfill$  Räume haben wir hier verwendet?
- □ Zeichne das Ergebnis einmal graphisch für dieselben Parameter wie oben. Was fällt dir auf? (%6)
- $\square$  Welches  $h \in \mathbb{R}^3$  ist bei der Ableitung  $d\omega(k_0)(h)$  gemeint? ( $\lozenge$ 7)

.....

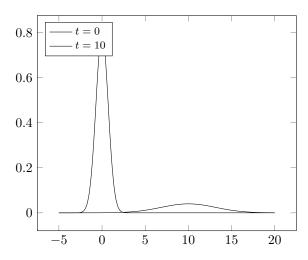


Abbildung 2: Die Forier-Summierte Gaußkurve für  $A=1,\,k_0=1$  in  $\mathbb R$  zum Zeitpunkt t=0 und t=10

## Zusammenfassung

→ Das Wellenpaket bewegt sich mit der Aufenthalserwartung

$$\langle r(t) \rangle = \int (r \cdot |\psi(t, r)|)_{r \in \mathbb{R}^3} \lambda(dr).$$

- $\rightarrow$  Das Wellenpaket im Ortsraum ist ebenfalls eine Gaußfunktion mit Peakbreite w(t) und Startwert  $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$ .
- $\rightarrow$  Das Wellenpaket erfährt Dispersion für t > 0 durch die Funktionsdefinition w:
- $\to$  Für  $t >> w(0)^2 \cdot m/\hbar$  ist  $w(t) \approx \hbar \cdot t/(2 \cdot w(0) \cdot m)$  linear von t abhängig. Für lange t ist die Dispersion also linear (und nicht proportional zu  $\sqrt{t}$ ).
- $\rightarrow$  Für die Mittelung  $\langle r(t) \rangle$  folgt

$$\Delta r^2 := \langle r(t_1) - \langle r(t_0) \rangle \rangle = \int \left( (r - \langle r \rangle) \cdot |\psi(t, r)| \right)_{r \in \mathbb{R}^3} \, \lambda \left( dr \right) = w(t)^2.$$

.....

- (§8)  $\Box$ 1 Berechne die Integrale  $\int x \cdot \exp(-x^2) \lambda(dx)$ ,  $\int x \cdot \exp(-(x-x_0)^2) \lambda(dx)$  und  $\int (x-x_0) \exp(-(x-x_0)^2) \lambda(dx)$  für  $x_0 \in \mathbb{R}$  auf  $(\mathbb{R}, \sigma(\mathbb{R}), \lambda)$ . Wie ist die Struktur?
- (§9)  $\square$  Rechne die Dispersion des Wellenpaketes für t>0 gemäß w nach und zeige  $w(t)^2>w(0)$ .

## 1.1 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Zunächst bemerken wir die Eigenschaft der Normerhaltung gemäß des Satzes von Parseval der Fourier-Summation. Es gilt

$$\int |\psi(t,r)|^2 \,\lambda(dr) = \int \frac{\left|\tilde{\psi}(k)\right|^2}{(2\cdot\pi)^3} \,\lambda(dk) = \int \frac{\left|\tilde{\psi}(p)\right|^2}{(2\cdot\pi\cdot\hbar)^3} \,\lambda(dp)$$

und für die Mittelung

$$\langle p \rangle = \int \frac{p \cdot \left| \tilde{\psi}(p) \right|^2}{(2 \cdot \pi \cdot \hbar)^3} \lambda (dp) := \int \frac{p \cdot \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{4 \cdot \hbar^2 \cdot \sigma^2}\right)}{(2 \cdot \pi \cdot \hbar)^3} \lambda (dp) \stackrel{\text{(.??)}}{=} p_0 = \hbar \cdot k_0.$$

Die mittlere Schwankung, also physikalisch die Genauigkeit des Impulses im Impulsraum, ergibt sich zu

$$\Delta p^2 = \langle (p - \langle p \rangle^2)^2 \rangle = \hbar^2 \cdot \sigma^2$$

wobei unter Verwendung von  $\Delta r^2 = w(t)^2$  folgt

$$\Delta r^2 = w(t)^2 \ge \left(\frac{1}{2 \cdot \sigma}\right)^2 = \frac{1}{4 \cdot \sigma^2},$$

sodaß mit beiden Gleichungen unter Produktbildung und Wurzelzug eine Ausdrucksweise der Unschärferelation, konkret jene von Heisenberg, folgt:

$$\Delta r \cdot \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}.$$

 $\begin{tabular}{ll} Theoretische\ Physik\ II \\ {\tt Skript} \end{tabular}$ 

 $\Box$  Lässt sich die Wellenfunktion direkt experimentell bestimmen? Recherchiere die *Quanten-* ( $\bigcirc$ 10) *Zustands-Tomographie*.

## Physikalische Bedeutung

Aus der Unschärferelation folgen folgende physikalische Konsequenzen:

- $\rightarrow$  Unmittelbar ist ablesbar, daß bei genauerer Ortsbestimmung die Impulsgenauigkeit abnimmt.
- $\rightarrow$  Für  $\Delta p \rightarrow 0$  (Fall ebene Welle) ist  $\Delta r \rightarrow \infty$ .
- $\rightarrow$  Der Phasenraum ist infolge der Unschärferelation quantisiert in Einheiten von  $\hbar$ .

## 1.2 Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Als Ziel der Untersuchungen ist eine Wellengleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\Psi$  zu finden. Wir lassen hierbei den mathematischen Beweis fallen und versuchen, die Gleichung zu "erraten".Mit unserem Ausdruck der Fouriertransformation  $\mathscr F$  und dem Diffeomorphismus  $p(t) := \hbar \cdot k(t)$  auf  $\hat{\psi} := \mathscr F \psi$  erhalten wir

$$\psi(t,r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \tilde{\psi}(p) \cdot f(t,r(t)) \,\lambda\left(dp\right) = (\mathscr{F}\hat{\psi})(t,r(t)).$$

Die Funktion f war dabei eine Abkürzung einer exp Verkettung, welche wir in zwei Kinderfunktionen aufteilen können:

$$f := \left( \exp \left( \mathring{\imath} \cdot (\langle p, r(t) \rangle - p^2 \cdot t/2m) / \hbar \right) \right)_{(t,r) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d} = f_1(t, r(t)) \cdot f_2(t, r(t)).$$

Für die Ableitung gilt dann

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left. \left[ \psi(s,r(s)) \right] \right|_{s=t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left. \left[ \mathscr{F} \hat{\psi}(s,r(s)) \right] \right|_{s=t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left( \frac{-\stackrel{\circ}{\imath}}{2m\hbar} \right) \cdot p^2 \cdot f(t,r(t)) \, \lambda \left( dp \right).$$

.....

 $\square$  Rechne nach, daß es sich bei p um einen Diffeomorphismus zwischen  $(\mathbb{R}, \tau_{\mathbb{R}})$  und  $(\mathbb{R}^3, \tau_{\mathbb{R}^3})$  (\$11) handelt und der Transformationssatz greifen kann. Welche Annahme musst du dabei machen?

 $\square$  Wie lautet die Ableitungen  $df_1(t,r)(0,h)$  und  $df_2(t,r)(0,h)$ ? Notiere den Ausdruck in verschiedenen Ableitungsdarstellungen. Ersetze  $p^2 \cdot f_1(t,r(t))$  durch den entsprechenden Ableitungsausdruck.

.....

Mit der Aufgabe folgt dann

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[ \psi(s,r(s)) \right] |_{s=t} = \frac{\mathring{\imath} \cdot \hbar}{2 \cdot m} d(\mathscr{F} \tilde{\psi})(t,r(t))(\hbar)(\hbar)$$

mit der Definition

$$\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)}(\mathscr{F}\hat{\psi})(t,r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \hat{\psi}(p) \cdot f(t,r(t)) \,\lambda(dp) \,.$$

Wir erhalten also die zeitabhängige Schrödingergleichung für freie Teilchen der Form

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left. \left[ \psi(s,r(s)) \right] \right|_{s=t} = \frac{\stackrel{\circ}{\imath} \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)} (\mathscr{F} \hat{\psi})(t,r(t)) = \frac{\stackrel{\circ}{\imath} \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)} \psi(t,r(t)).$$

.....

- ( $\bigcirc$ 13)  $\square$  Berechne die Ableitung df(t, r(t))(0, h). Berechne weiter  $d\psi(t, r(t))(1, 0)$  und verifiziere dadurch den oberen Funktionsausdruck.
- (№14) ☐ Klassifiziere die Schrödingergleichung. Welche Ordnung hat sie? Schreibe sie in eine Form, bei welcher die rechte Seite reell ist.
- ( $\otimes$ 15)  $\square$  Benenne drei Beispiele  $(s, S) \in Anfangswert(\psi)$ .
- (§16)  $\square$  Wie steht die erhaltene Schrödingergleichung mit der Diffusionsgleichung  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[\phi(s,x(s))\right]|_{s=t} = D \cdot \mathbb{D}_{(h,h)} \psi(t,s(t))$  im Zusammenhang? Stelle Ähnlichkeiten und Unterschiede heraus.
- (№17) □ Betrachte die Dispersionsreihe

$$E(p) = \sum_{n(x)=0}^{\infty} \sum_{n(y)=0}^{\infty} \sum_{n(z)=0}^{\infty} c(n(x), n(y), n(z)) \cdot p(1)^{n(x)} \cdot p(2)^{n(y)} \cdot p(3)^{n(z)}.$$

Wie kann man die Reihe umdefinieren für Operatoren? In welchem Raum liegt  $\mathscr{E}_E := E(o)$ , wenn  $o = -\mathring{i} \, h \cdot \mathbb{D}_{(h,h)}$ ?

(§18)  $\square$  Verallgemeinere mit dem Operator  $\mathscr{E}_E$  die Gleichung auf beliebige Dispersionen.

.....

 $VL\ 4$  Um eine Lösung dieser partiellen Differentialgleichung zu erhalten, müssen wir mit 03.05.2023, dem Seperationsansatz beginnen. 08:15

#### Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wir spalten unser  $\phi$  in die Funktionen  $\phi$  und  $\chi$  auf nach der Form  $\psi(t,r(t)) = \phi(r(t)) \cdot \chi(t)$ . Wir nehmen hierbei an, daß dies problemlos möglich ist; typische Tücken des Seperationsansatz. Wir fordern sogar weiter, daß  $\int |\psi(t,r(t))| \lambda(dt) = 1$ , sodaß die implizite Bedingung  $\chi(t) \neq 0$  für alle  $t \in \mathbb{R}$  folgt. Setzen wir diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir

$$\phi(r(t)) \cdot \mathring{i} \, \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[ \chi(s) \right]_{s=t} = \chi \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \cdot \mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)} \phi \left( t \right).$$

.....

(§19) 
$$\square$$
 Rechne nach, daß  $\int |\psi(t,r(t))| \ \lambda \left(dt\right) = 1$  zu  $\chi(t) \neq 0$  für alle  $t \in \mathbb{R}$  führt.

Nun ist der weitere Ansatz das Dividieren durch  $\phi(r(t))$  und  $\chi(t)$ , um gemäß der Seperationschablone zeit- und ortsabhängige Funktionen voneinander zu trennen. Für  $\chi(t)$  wissen wir durch unsere Annahme, daß sie ungleich Null sein wird; Für  $\phi(r(t))$  müssen wir eine Fallunterscheidung machen. Schematisch erhalten wir zunächst

$$\hat{i} \, \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[ \chi(s) \right]_{s=t} \cdot \frac{1}{\chi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)} \chi \left( t \right) \cdot \frac{1}{\phi(r(t))} = const. =: E.$$

Skript

Mit dem Analyseblick erkennen wir  $(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t))/\chi(t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ln(t),$ sodaß

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[ \chi(s) \right]_{s=t} = -\frac{\hat{i} \cdot E}{\hbar} \Leftrightarrow \chi(t) = C_1 \cdot \exp\left(-\frac{\hat{i} \cdot E \cdot t}{\hbar}\right),$$

Wobei die Konstante  $C_1$  Resultat der Integration  $\int f dt$  ist. Für die rechte Seite gilt zunächst

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \mathbf{D}_{(\hbar,\hbar)} \phi\left(r(t)\right) = E \cdot \phi(r(t)),$$

schematisch nahe der Laplace-Gleichung. Wir haben es hierbei konkret mit einem verallgemeinerten Eigenwertproblem zutun, welche wir spezieller in  $[\to \text{math. Grund. der Quant.}]$  behandeln werden. In diesem Kontext reicht uns der Name zeitunabhängige Schrödingergleichung. Der ausstehenden Fallunterscheidung kommen wir nun nach: Für  $\phi(r(t)) = 0$  erhalten wir  $D_{(\hbar,\hbar)}\phi(r(t)) = 0$ , wodurch die Schrödingergleichung ebenfalls gilt; Wir hatten also bei unserem zunächst frei angenommenen Seperationsansatz Glück.

.....

 $\square$  Begründe, warum die Annahme der Konstante E im Seperationsansatz gerechtfertigt ist. ( $\triangleright$ 20)

$$\square$$
 Zeige, daß aus  $\phi(r(t)) = 0$  folgt, daß  $D_{(\hbar, \hbar)}\phi(r(t)) = 0$ . (\$\infty\$21)

.....

Als Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung erhalten wir  $\phi(r(t)) = C_2 \cdot \exp\left(i \cdot \langle k, r(t) \rangle\right)$ , welche der Form einer implizit zeitunabhängigen ebenen Welle entspricht. Zusammengesetzt gilt für  $\psi$  demnach

$$\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\left(\mathring{i} \cdot \left(\langle k, r(t) \rangle - \frac{\hbar \cdot k^2}{2m} \cdot t\right)\right),$$

wobei wir  $E = \hbar^2 \cdot k^2/(2m)$  setzen.

## 1.3 Allgemeine Form der Schrödingergleichung

Bisherig nahmen wir an, daß unsere betrachteten Teilchen kräftefrei sind. Erweitern wir unseren Blick auf konservativ kräftebefallene Teilchen, existiert ein Kraftpotential V sodaß F(t,r(t)) = -dV(t,r(t))(h) gilt. Im klassischen Betrachtungsfall haben wir bereits die Hamiltonfunktion kennengelernt:

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

Wir wollen nun die Schrödingergleichung erraten: angenommen, wir haben ein sehr schmales Wellenpaket relativ zur Änderung von V, sodaß wir eine gute Approximation von V am Ort (t, r(t)) durch  $V(t_0, r(t_0))$  erhalten. Für die Funktion  $p \mapsto H(t, (r, p))$  mit der Dispersionsreihe  $\mathscr E$  erhalten wir

$$\mathring{\imath}\,\hbar\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s,r(s))\right]|_{s=t}=\mathscr{E}_{H}(\psi(t,r(t)))\quad(=H(t,(r(t),-\mathring{\imath}\,\hbar\nabla))),$$

wobei der geklammerte Term eine *Schreibweise* zur Erinnerung an die klassische Hamiltonfunktion ist. Damit folgt die *allgemeinste* Version der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für einzelne Teilchen als fundamentalen quantenmechanischen Zusammenhang:

$$\stackrel{\circ}{\imath} \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left. \left[ \psi(s,r(s)) \right] \right|_{s=t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)} + V(t,r(t)) \right) (\psi(t,r(t))).$$

	Es handelt sich hier wieder um ein AWP: Die Gleichur Anfangswert $(s, S) \in AW(\psi)$ .	ng lost sich also eindeutig für einen				
(№22)	$\square$ Wie muss man $t_0 \in \mathbb{R}$ wählen, sodaß die Approximation von $V$ ausreichend gut ist? Was					
, ,	bedeutet "schmal relativ zur Änderung von V"?					
(№23)	3) $\square$ Wie sieht die suggerierte Auswertung des Ausdrucks $(\cdot + \cdot)(\psi(\cdot))$ aus? Was bedeute Schreibweise?					
(№24)						
	Recherchiere dazu im Nolting und beachte die folgende Optikanalogie:					
	Mechanik O	ptik				
		enoptik				
	<b>\$</b>	<b>†</b>				
	klassische Mechanik   geometri	ische Optik				
(№25)	□ Schlage alternative Formulierungen der Schrödingergleichung nach. Beachte als Beispiel die Feynmanschen Pfadintegrale ausgehend von Langrangian.					
	In dem Ausdruck kann man schon den $Hamilton$ -Ope $\mathbb{D}_{(\hat{n},\hat{n})} + V(t,r(t))$ , welchen wir näher in $[\to \text{math. Gruin}]$ in diesem verschachtelt sehen wir den Impulsoperato math. Grund. der Quant.] ( $dringend\ empfohlen$ ).	und. der Quant.] betrachten. Sogar				
(№26)	□ Meditiere eine halbe Stunde über den letzten Sätzen. Lege dir das Skript der Funktionalanalysis					
	und der mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik bei.					
	ch hier bereit feststellen: Die Obserlinear und (meist) selbstadjungiert bei von dem Korrespondenzprinzip. en die Eigenschaft hermitesch, im een, erfüllen.					
	Explizit zeitunabhängiger Fall					
VL 5 May the forth be with you!	Einzig im explizit zeitunabhängigen Fall $\frac{d}{dt}\hat{H}=0$ funktioniert der oben beschriebene Seperationsansatz $\psi=\phi\cdot\chi$ . In diesem Fall erhalten wir wieder ein verallgemeinertes Eigenwertproblem.					
(№27)	$\square$ Was bedeutet der Ausdruck $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{H}$ ? Entpacke ihn, indem du	u die Operatordefinitionen verwendest.				
• /	di -	<del>-</del>				

11

Skript

## Lösungen

Liegen uns Lösungen  $(\psi_n)_{n\in I}$  der Schrödingergleichung vor, so können wir diese als Orthonormalbasis für den Hilbertraum verwenden. Es gilt demnach

$$\int \phi_n(x) \cdot \overline{\phi_m(x)} \, \lambda \, (dx) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad [\text{siehe Skalarprodukt } \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3)].$$

Damit ist auch eine Linearkombination  $\Phi = \sum_{i \in I} c_i \cdot \phi_i$  mit  $c \in \text{Abb}\left(I, C^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})\right)$  von Lösungen  $\phi_i$  eine Lösung der Schrödingergleichung.

.....

 $\square$  Diese Aussage beruht auf dem folgenden Satz: Ist T ein selbstadjungierter Operator mit  $\sigma_c(T) = \emptyset$ , dann ist  $\sigma_P(T)$  höchstens abzählbar und es existiert eine ONB von  $\mathscr H$  aus Eigenfunktionen von T. Zeige diesen Satz aus der Operatortheorie.

.....

Setzt man eine solche Lösung in die Schrödingergleichung ein, so erhält man

$$\hat{i} \, \hbar \cdot \sum_{i \in I} E_i(t) \cdot \phi_i(r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(t) \cdot \hat{H} \phi_i(r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(t) \cdot E_i \phi_i(r(t)),$$

und mit  $\phi$  Orthonormalbasis

$$\mathring{i} \hbar \cdot c_i'(t) = E_i c_i(t) \Longleftrightarrow c_i(t) = c_i(0) \cdot \exp\left(-\mathring{i} E_i t / \hbar\right),$$

wobei die  $c_i(0)$  aus den Anfangsbedingungen folgen:

$$c_i(0) = \int \overline{\phi_i}(x) \cdot \psi(0, x) \lambda(dx).$$

Damit können wir im letzten Schritt durch Zusammenfassung eine allgemeine Lösung der zeitabhängigen AWPs konstruieren:

$$\Phi(t, r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(0) \cdot \exp\left(-\stackrel{\circ}{i} Et/\hbar\right) \cdot \phi_i(r(t)).$$

## Stationäre Zustände

Im letzten Abschnitt haben wir eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung konstruiert. Ist  $\Phi$  nun eine solche konstruierte Lösung, dann ist für ein spezielles  $c \in \text{Abb}\left(I,C^1(\mathbb{R},\mathbb{C})\right)$  mit  $c_n(t)\neq 0$  für ein singuläres  $n\in I$  für  $\Phi$  der Ausdruck

$$\Phi(t, r(t)) = c_n(t) \cdot \phi_n(r(t)) \cdot \exp\left(-\stackrel{\circ}{i} Et/\hbar\right) = c_n(t) \cdot \Phi(0, r(t)) \cdot \exp\left(-\stackrel{\circ}{i} Et/\hbar\right),$$

wobei in dem Absolutbetrag  $|\psi(t,r(t))|=|\psi(0,r(t))|$  gilt. Man spricht hier von einem stationären Zustand.

## 1.4 Normierung und Erwartungswert

Wir wollen nun den Wahrscheinlichkeitsaspekt von  $|\psi(t,r(t))|^2$  näher betrachten. Wir definieren zunächst das  $Ma\beta$  mit Dichte  $\mu_{\psi}:=\left(\int |\psi(t,x)| \; \lambda_A\left(dx\right)\right)_{A\in\mathscr{B}(\mathbb{R}^3)}$ . Nun ist die Forderung von  $\Gamma:=\left(\left|\psi(t,r(t))\right|^2\right)_{(t,r(t))\in\mathrm{Def}(\psi)}$  als Gewichtungsfunktion die Eigenschaft  $P_{\mu_{\psi}}(\mathbb{R}^3)=1$  unseres gewünschten  $Wahrscheinlichkeitsma\betaes$   $P_{\mu_{\psi}}$ 

.....

(\$29)  $\square$  Zeige für  $\psi = c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$  mit geeigneten Gewichtungsfunktionen  $c_1, c_2$  die Eigenschaft  $\mu_{\psi}(\mathbb{R}^3) \neq 1$ . Ist dies ein Widerspruch zwischen dem Superpositionsprinzip und der Normierung?

Normierbare  $\psi$  müssen nach der Aufgabe also die Eigenschaften (i)  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  und (ii)  $\mu_{\psi}(\mathbb{R}^3) \neq 0 \Leftrightarrow \psi \neq 0$  erfüllen. Dann ergibt sich eine Normierung durch

$$P_{\psi}(t, r(t)) := \frac{|\psi(t, r(t))|^2}{\mu_{\psi}(\mathbb{R}^3)},$$

wobei  $P_{\psi}$  unser gewünschtes Wahrscheinlichkeitsmaße ist.

.....

- (§30)  $\square$  Zeige, daß alle  $\psi$ , welche die Normierungsbedingungen erfüllen, zusammen mit dem Nullvektor  $0_{\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3)}$  einen Vektorraum bilden. Welcher Raum ist es dann?
- (§31)  $\square$  Zeige, daß die  $\psi$  zwar einen physikalischen Zustand beschreiben, jedoch nicht eindeutig wählbar sind.

......

## Zeitabhängigkeit der Normierung

Betrachten wir die Zeitableitung unseres auf  $\psi$  konstruierten Maßes  $P_{\psi}$  auf einer Menge  $A \subseteq \mathbb{R}^3$ , müssen wir zunächst sicherstellen, daß  $\mu_{\psi}(\mathbb{R}^3)$  zeitunabhängig ist:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mu_{\psi}(\mathbb{R}^{3}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\left|\psi(t,x)\right|^{2}\,\lambda_{\mathbb{R}^{3}}\left(dx\right) = \int\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\psi(t,x)}\,\lambda_{\mathbb{R}^{3}}\left(dx\right) + \int\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\psi(t,x)}\,\lambda_{\mathbb{R}^{3}}\left(dx\right).$$

Schreibt man die Definitionen sauber aus, dann bleibt nach Kürzung lediglich

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mu_{\psi}(\mathbb{R}^{3}) = \frac{-\stackrel{\circ}{n}\hbar}{2m} \cdot \int \overline{\psi(t,x)} \cdot D_{h}^{2}\psi(t,x) - \psi(t,x) \cdot D_{h}^{2}\overline{\psi}(t,x) \,\lambda_{\mathbb{R}^{3}} (dx)$$

$$= -\int D_{h} \left( \frac{-\stackrel{\circ}{n}\hbar}{2m} \cdot \left[ \overline{\psi} \cdot D_{h}\psi - \psi \cdot D_{h}\overline{\psi} \right] \right) (t,x) \,\lambda_{\mathbb{R}^{3}} (dx).$$

.....

- ( $\bigcirc$ 32)  $\square$  Rechne alle Schritte gründlich nach, um den letzten Ausdruck zu erhalten. [In der Vorlesung war der Vorgang zu schnell.]
- (§33)  $\square$  Wende nun den Satz von Gauß auf den letzten Ausdruck an. Wie muss man korrekt Umgehen mit der Hilfsidee "Rand von  $\mathbb{R}^3$ "? Erhalte im letzten Schritt  $\frac{d}{dt}\mu_{\psi}(\mathbb{R}^3)=0$ .
- (\$34)  $\square$  Berechne nun die Ableitung  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mu_{\psi}(A)$ .

13

Theoretische Physik II Skript

Definiere nun den Wahrscheinlichkeitsstrom

$$j(t, r(t)) := \frac{-\stackrel{\circ}{i} \hbar}{2m} \cdot \left[ \overline{\psi} \cdot D_h \psi - \psi \cdot D_h \overline{\psi} \right].$$

Dann kann man die Kontinuitätsgleichung wiederfinden:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Gamma(t,r(t)) + D_h j(t,r(t)) = 0.$$

## Erwartungswerte

Als Mittelung über die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_{\psi}$  definieren wir den Erwartungswert

$$E_{P,r}(t) := \left( \int r \cdot P_{\psi}(t,r) \, \lambda_A\left(dx\right) \right)_{A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^3)},$$

und für allgemeinere Funktionen des Ortes  $f \in Abb(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ 

$$E_{P,r,f}(t) := \left( \int f(r) \cdot P_{\psi}(t,r) \,\lambda_A\left(dx\right) \right)_{A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^3)}.$$

#### Wellenfunktion im Impulsraum 1.5

Wir hatten bereits gesehen, daß wir ein Wellenpaket mit  $\psi(0, r(t)) = \mathscr{F}\psi(0, (p \circ r)(t))$ konstruieren können. Für ein allgemeineres  $t \in \mathbb{R}$  haben wir

$$\psi(t, r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \mathscr{F}\psi(t, p) \cdot \exp\left(-\frac{\mathring{i} p \cdot r(t)}{\hbar}\right) \lambda (dp)$$

und

$$\mathscr{F}\psi(t,(p\circ r)(t)) = \int \psi(t,x) \cdot \exp\left(\frac{i\langle(p\circ r)(t),x\rangle}{\hbar}\right) \lambda(dx).$$

Die Auswirkungen auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung sind

$$P_{\mathscr{F}\psi}(t,(p\circ r)(t)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot P_{\psi}(t,(p\circ r)(t)).$$

 $\hfill \Box$  Weise die letzte Gleichung nach. Verwende hierzu die Definition von P und nutze Linearität.

 $\square$  Berechne nun die Erwartungswerte  $E_{P,p}(t)$  und  $E_{P,p,f}(t)$ . (36)

*VL 6* 05.05.2023,11:45

#### 1.6 Operatoren

Zunächt sei ein dringender Verweis zur Funktionalanalysis I II und Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik gegeben.

Wir stellen uns die Frage, ob  $\langle p \rangle$  oder  $\langle g(p) \rangle$  direkt aus  $\psi(t, r(t))$  bei fixiertem  $t_0 \in \mathbb{R}$  berechnet werden kann, ohne die Fouriertransformation zu verwenden. Zunächst gilt

$$\langle p \rangle_{\psi} := E_{P(\mathscr{F}\psi),p}(t_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int p \cdot |\mathscr{F}\psi(t_0,p)|^2 \lambda_{\mathbb{R}^3} (dp),$$

wobei wir den komplexen Betrag der Fouriertransformierten von  $\psi$  verwenden. Es gilt weiter nach Definition

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int p \cdot \int \int \overline{\psi(R)} \cdot \psi(r) \cdot \exp\left(-\frac{\stackrel{\circ}{i} \cdot p \cdot (r-R)}{\hbar}\right) \lambda_{\mathbb{R}^3} (dR) \ \lambda_{\mathbb{R}^3} (dr) \ \lambda_{\mathbb{R}^3} (dp) \ ,$$

wobei wir durch Umsortieren der Integrale

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int \left( \int \left[ \int \overline{\psi(R)} \cdot \psi(r) \cdot \stackrel{\circ}{i} \hbar \cdot D_h(\exp \circ g_R)(r) \lambda_{\mathbb{R}^3} \left( dR \right) \right] \lambda_{\mathbb{R}^3} \left( dr \right) \right) \lambda_{\mathbb{R}^3} \left( dp \right)$$

mit  $g_R := (-\stackrel{\circ}{i} \cdot p \cdot (r-R))_{r \in \mathbb{R}^3}$  und  $h \in \mathbb{R}^3$ . Mit partieller Integration  $\int f'(x) \cdot g(x) \left(\mathbb{1}_{[a,b]} \cdot \mu(dx)\right) = [f(x) \cdot g(x)]_a^b - \int f(x) \cdot g'(x) \left(\mathbb{1}_{[a,b]} \cdot \mu(dx)\right)$  folgt

$$-\int\int\int\overline{\psi(R)}\cdot\mathring{\imath}\,\hbar\cdot D_h\psi(r)\,\lambda_{\mathbb{R}^3}\left(dR\right)\,\lambda_{\mathbb{R}^3}\left(dr\right)\cdot\underbrace{\int\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot\exp\Biggl(\frac{-\mathring{\imath}\,p\cdot(r-R)}{\hbar}\Biggr)\lambda_{\mathbb{R}^3}\left(dp\right)}_{=\int R\left(\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3}\cdot\delta_r\right)}.$$

Mit  $\int R (\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta_r) = 1$  für r = R folgt

$$\int \overline{\psi(r)} \cdot (-\stackrel{\circ}{i} \hbar D_h) \psi(r) \lambda_{\mathbb{R}^3} (dr) =: \langle P \rangle,$$

wobei  $\langle \cdot \rangle$  den Erwartungswert des Punktes ist, welcher in diesem Fall der *Operator* P ist.

......

- (\$\infty\$37) \quad \text{Verifiziere } \mathscr{\mathscr{F}}(1)\_{x \in \mathbb{R}^3} = \int x \left( \mathbb{1}\_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta\_{0\_\mathbb{R}^3} \right). Schreibe hierzu die Fouriertransformation \mathscr{F}(1)\_{x \in \mathbb{R}^3} \text{aus. Was ergibt } \int f(x) \cdot \mathscr{\mathscr{F}}(1)(x) \lambda\_{\mathbb{R}^3} \( (dx) \)?
- (§38)  $\square$  Recherchiere das Skalarprodukt auf  $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \lambda)$  Räumen. Findest du eine Verbindung zu den betrachteten Integralen?

#### Zusammenfassen

Für einen linearen stetigen Operator  $T \in L_S(\mathcal{H})$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  gilt für den Erwartungswert

 $\langle T \rangle_{\psi} := \int \overline{\psi(r)} \cdot (T \circ \psi)(r) \, \lambda_{\mathscr{H}} \left( dr \right).$ 

(§39)  $\Box$  Zeige der vorigen Rechnung folgend die Aussage  $\langle g(p) \rangle = \langle g(P) \rangle_{\psi}$  für  $p \in \mathbb{R}^3$  und  $P \in L_S(\mathbb{R}^3)$ , indem man für analytische g eine Potenzreihenentwicklung durchführt.

Wenn  $x \in \mathbb{R}^3$  ein Vektor der Form  $[3] \to \mathbb{R}$  ist, dann ist der zugeörige Operator X eine Abbildung aus dem Definitionsbereich von x in den Raum  $L_S(\mathbb{R})$  der stetigen linearen Operatoren auf R gemäß  $X : [3] \to L_S(\mathbb{R})$ .

## Operatoren der Quantenphysik

In der Quantenmechanik beschreiben wir Observable nun durch Identifikation mit Operatoren:

MessgrößeOperatorEnergie
$$,\hat{H} = H(t,(r(t),\hat{p}(t)))^{"}$$
Impuls $,\hat{p} = -\hat{i} \hbar D_h^{"}$ Ort $,\hat{r} = (r(x) \cdot x)_{x \in \mathscr{H}}^{"}$ 

Wie in der Physik üblich handelt es sich hier allerdings nur um *Sprechweisen*, welche an die mathematischen Hintergründe im physikalisch ausreichenden Sinne *erinnern*.

Die sogenannten Eigenzustände sind Lösungen des verallgemeinerten Eigenwertproblemes  $T(\psi) = \lambda \cdot \psi$  zu dem verallgemeinerten Eigenwert  $\lambda \in \mathbb{C}$  und einem Operator  $T \in L_S(\mathscr{H})$  über dem komplexen Hilbertraum  $\mathscr{H}$ . Ist  $\psi$  ein solcher Eigenzustand von T, so ist der Erwartungswert

$$E_{T(\psi),}(t_0) = \int \overline{\psi(t_0, r)} \cdot (T \circ \psi)(t_0, r) \,\lambda_{\mathbb{R}^3} (dr)$$
$$= \int \overline{\psi(t, r)} \cdot \lambda \cdot \psi(t_0, r) \,\lambda_{\mathbb{R}^3} (dr) = \lambda \cdot E_{P(\psi), r}(t_0)(\mathbb{R}^3) = \lambda.$$

.....

 $\square$  Zeige die Aussage  $E_{T(\psi),x}(t)(\mathbb{R}^3) = \lambda^2$ . (\$\infty\)

 $\square$  Zeige die *Varianz* des Operators  $T \in L_S(\mathbb{H})$  mit  $\psi \in \mathbb{H}$  als Eigenzustand zu  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Erhalte  $\operatorname{var}_{\psi} T^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0$ . Benutze hierzu das Ergebnis  $E_{T^2(\psi),x}(t) = \lambda^2$ .

.....

Wir können folgern  $\operatorname{var}_{\psi}(T)=0$  genau dann, wenn  $\lambda$  ein verallgemeinerter Eigenwert von T bezüglich  $T\psi=\lambda\cdot\psi$ . Wir nennen den Operator T in diesem Zusammenhang scharf im Zustand  $\psi$ . Die Hinrichtung dieser Behauptung ist mit der obigen Aufgabe gelöst, für die Rückrichtung betrachen wir  $\psi$  als Linearkombination von Eigenzuständen  $(\phi_i)_{i\in I}$  des Operators T, dann gibt es  $c\in\mathbb{C}^{\operatorname{card}(I)}$  mit  $\psi=\sum_{i\in I}c_i\cdot\phi_i$ . Das Integral  $\int\psi$  ist demzufolge

$$\int \psi = \langle \psi_i, \psi_j \rangle_{\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3)} = \delta_n(m),$$

also die gewählte Folge  $(\phi_i)_{i\in I}$  stellt eine ONB. Wir können den Erwartungswert von T ausschreiben zu

$$\langle T \rangle_{\psi} := \int \overline{\psi(\tau) \cdot \tau \cdot \psi(\tau)} \, \lambda_{\mathbb{R}^3} \left( d\tau \right) = \sum_{(i,j) \in I^2} c_i \cdot c_j \cdot \int \overline{\phi_i(\tau)} \cdot \tau \cdot \phi_j(\tau) \, \lambda_{\mathbb{R}^3} \left( d\tau \right).$$

.....

□ Fülle die Beweislücke, indem du  $\sum_{(i,j)\in I^2} c_i c_j \cdot \int \overline{\phi_i(\tau)} \cdot \tau \cdot \phi_j(\tau) \lambda_{\mathbb{R}^3} (d\tau) = \sum_{n\in I} \lambda_n \cdot |c_n|^2$  (\$42) für  $\lambda \in \mathbb{C}^{\operatorname{card}(I)}$  Eigenwerte zu T und  $|c_n|^2 \in [0,1]$  zeigst.

......

Mit dem Ergebnis der Aufgabe folgt dann weiter

$$\operatorname{var}_{\psi}(T) = \sum_{n \in I} \lambda_n^2 \cdot |c_n|^2 - \sum_{(m,n) \in I^2} \lambda_n \cdot \lambda_m \cdot |c_n|^2 \cdot |c_m|^2.$$

(№44)

Nach Voraussetzung haben wir die Gleichheit  $\mathrm{var}_{\psi}(T)=0$ . Nun wollen wir noch folgern, daß  $\phi_n$  für ein  $n\in I$  gleich unserem ursprünglichen  $\psi$  sein muss, sodaß  $\psi$  als Eigenzustand von T identifizierbar ist.

.....

Zeige dieses nötige Hilfsergebnis. Zeige hierzu konkret, daß für ein  $n \in I$  der Faktor  $|c_n|^2$  ungleich Null bleibt, jedoch für alle übrigen  $m \in I \setminus \{n\}$  verschwindet. Nutze hierzu  $\operatorname{var}_{\psi}(T) = \langle \psi, (T - \operatorname{id}_{\mathscr{H}}(\langle T \rangle_{\psi})^2(\psi) \rangle_{\mathscr{H}} = 0$  und die Übertragbarkeit der Eigenwerte von T auf  $\operatorname{var}_{\psi}(T)$ . Erhalte damit die oder Aussage  $|c_i|^2 = 0$  oder  $\mu_i = 0$  genau dann, wenn  $\langle T \rangle_{\psi} = \lambda_i$ . Führe noch eine Fallunterscheidung für  $n, m \in I$  bezüglich der Eigenwerte  $\lambda_n, \lambda_m$  durch. Folgere mit dieser Aussage den Abschluss der Rückrichtung des Beweises.

......

## Anwendungsbeispiele

Für den Hamiltonoperator H sind alle Eigenwerte  $E \in \mathbb{C}$  feste Energien, sodaß  $H(\psi) = E \cdot \psi$  für Eigenzustände  $\psi$  gilt.

Der Impulsoperator ist ein weiteres anschauliches Paradebeispiel für Eigenzustände. Ist  $P(\psi) = -\mathring{i} \hbar D_h \psi(x)$  für eine Funktion  $\psi$  und ein  $h \in \mathbb{R}^3$  gegeben, so ist  $P(\psi) = p \cdot \psi$  für  $p \in \mathbb{R}^3$  genau dann, wenn  $\psi$  eine ebene Welle ist, also  $\psi(x) = \mathring{i} \hbar^{-3/2} \cdot \exp\left(\mathring{i} \cdot \langle p, x \rangle\right)$  gilt.  $\square$  Betrachte einmal selbst das Beispiel des Ortsoperators  $R \in L_S(\mathbb{L}^2(\mathbb{R}))$  mit  $R(f) := (x \cdot \hat{i} \cdot \hat{i})$ 

.....

#### 1.7 Der Kommutator

Die klassische Physik zeichnet sich gegenüber der Quantenmechanik dadurch aus, daß die Messung von zwei Observablen A, B unabhängig voneinander ist und dadurch insbesondere scharf messbar sind. In der Quantenmechanik ist dies nicht der Fall, da die Messung von A den Zustand des Systems verändert und dadurch die Messung von B beeinflußt. Wir wollen nun die Unschärfe von zwei Observablen A, B durch den Kommutator [A, B] definieren. Dieser wird sich als Antwort auf die bisher ungeklärten Fragen

- (i) Wann können zwei Observablen A, B gleichzeitig scharf gemessen werden?
- (ii) Falls A, B nicht gleichzeitig scharf messbar sind, wie groß ist die Unschärfe?

erweisen. Für die zweite Frage haben wir sogar schon das Anwendungsbeispiel der Unschärferelation von Heisenberg kennengelernt. Den Kommutator definieren wir hierbei derart, daß bei Kommutativität von  $A \circ B$  in  $\circ$  der Wert  $0_{L_S(\mathscr{H})}$  für alle im Definitionsbereich liegenden Zustände  $\psi$  zugewiesen wird. Dies führt uns zu

$$[A,B] := (A \circ B - B \circ A)_{f \in D},$$

wobei  $D:=\{f\in \mathrm{Def}(B): B(x)\in \mathrm{Def}(A)\}\cap \{f\in \mathrm{Def}(A): A(f)\in \mathrm{Def}(B)\}$  gilt. Mit unserer Terminologie sagen wir nun

A und B gleichzeitig scharf genau dann, wenn [A, B] = 0 gilt.

**Beweis.** Nach Definition sind A, B in  $\psi$  an Stelle  $n \in I$  aus einer Eigenbasis  $(\phi_n)_{n \in I}$  des betrachteten Hilbertraumes  $\mathscr{H}$  genau dann scharf, wenn  $\lambda_A, \lambda_B \in \mathbb{C}$  existieren, sodaß  $A(\psi) = \lambda_A \cdot \psi$  und  $B(\psi) = \lambda_B \cdot \psi$  gilt. Dann folgt die Gleichungskette

$$(B \circ A)(\psi) = \lambda_A \cdot B(\psi) = \lambda_A \cdot \lambda_B \cdot \psi = \lambda_B \cdot A(\psi) = (A \circ B)(\psi),$$

woraus die Hinrichtung folgt.

Wenn andersherum [A, B] = 0, dann wissen wir  $A \circ B - B \circ A = 0$  und

$$(A \circ B)(\psi) = (B \circ A)(\psi) \stackrel{(i)}{=} \lambda_A \cdot B(\psi).$$

Daraus können wir ablesen  $B(\psi) \in \mathrm{EV}(A)$  zu  $\lambda_A$  als Eigenwert von  $A(\psi) = \lambda_A \cdot \psi$  (i). Damit stimmen die normierten Eigenvektoren von A und B überein, was die Rückrichtung beweist. q.e.d.

#### Anwendungsbeispiele

In den Ortsoperator  $R(f) := (x \cdot f(x))_{x \in \mathscr{H}}$  und  $P_h(f) := \left(-\stackrel{\circ}{\imath} \cdot D_h f(x)\right)_{x \in \mathscr{H}}$  können wir zunächst in rechter Verkettung  $(P \circ R)$  auswerten zu

$$(P \circ R)(f)(x) = \left(-\stackrel{\circ}{i} D_h f(x)\right)_{x \in \mathscr{H}} (x \cdot f(x)) = -\stackrel{\circ}{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} t \cdot f(t)|_{t=x},$$

woraus durch Anwendung der Produktregel der Ausdruck –  $\mathring{i} \, \hbar \cdot x \cdot_{\mathscr{H}} (f(x) + f'(x))$  folgt. Insgesamt folgt dann

$$[P,R] = {\stackrel{\circ}{i}} \, \hbar \cdot \mathrm{id}_{\mathscr{H}} \,.$$

.....

 $\square$  Wir bewiesen einmal, daß  $[A,B] \neq -\hat{i} \hbar \cdot id_{\mathscr{H}}$  für  $A,B \in L_S(\mathscr{H})$ , wobei A,B beschränkt und (\$\@45) selbstadjungiert sind. Warum gilt hier doch Gleichheit?

 $\square$  Rechne komponentenweise den Abstand  $[R_i, P_j]$  nach. Folgere  $[R_i, P_j] = \mathring{i} \, \hbar \cdot \delta_i(j) \cdot \mathrm{id}_{\mathbb{H}}$ . (\$46)

Anschaulich können wir mit diesen Ergebnissen folgern, daß die Messung in unter-

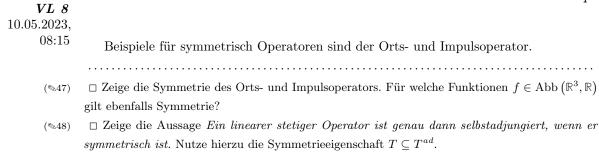
schiedliche Richgungen scharf möglich ist.

Betrachten wir den Hamiltonoperator H im Kommutator mit dem Ortsoperator R, dann gilt stets  $[H,R] \neq 0$  genau dann, wenn es keine stationären Zustände mit scharfem Ort gibt (bedenke das  $Zerflie\beta en$  eines Wellenpaketes). Ist die potentielle Energie V=0, dann gilt andersherum für den Impulsoperator P und den Hamiltonoperator [H,P]=0. Dies ist beispielsweise bei freien Teilchen und ebenen Wellen der Fall.

#### Hermitsche Operatoren

Eine besondere Operatoreigenschaft für in der Quantenmechanik auftretende lineare, dicht definierte Operatoren  $T \in L_S(\mathcal{H})$  ist hermitsch (auch symmetrisch), wenn:

$$\langle \psi_1, T(\psi_2) \rangle_{\mathscr{H}} = \langle T(\psi_1), \psi_2 \rangle_{\mathscr{H}}$$



## Eigenschaften symmetrischer Quantenoperatoren

Als Quantenoperator bezeichnen wir meist stetige, lineare, dicht definierte Operatoren. Ist T ein solcher und zusätzlich symmetrisch, so können wir einige nützliche Eigenschaften feststellen. Betrachtet man zuerst einmal die Erwartungswerte von T, so finden wir

$$\langle T \rangle_{\psi}^* = \langle \psi, T(\psi) \rangle_{\mathscr{H}}^* = \langle T(\psi), \psi \rangle_{\mathscr{H}} = \langle T \rangle_{\psi}.$$

Damit sind die Erwartungswerte von T reell. Selbiges gilt für die Eigenwerte von T, wodurch das  $Punktspektrum \sigma_P(T) \subseteq \mathbb{R}$  ist. Dies begründet die physikalisch notwendige Messbarkeit von T.

Der zweiten Frage, deren Antwort wir noch schuldig sind, wollen wir im folgenden Kapitel begegnen.

## 1.8 Heisenbergsche Unschärferelation (II)

Die Heisenbergsche Unschärferelation haben wir bereits kennengelernt. Ihren Zusammenhang zur Operatorunschärfe wollen wir nun jedoch genauer beleuchten: seien hierzu  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathcal{H})$  quadratintegrierbar mit der speziellen Eigenschaft  $\int |\psi|^2 = 1$ . Seien  $A, B \in L_S(\mathcal{H})$  weiter zwei symmetrische Observablen und  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum. Mit dem Kommutator können wir die Fragestellung nun neu ausdrücken:

Wenn 
$$[A, B] \neq 0$$
, wie "klein" können  $var_{\psi}(A)$ ,  $var_{\psi}(B)$  werden?

Rufe die Definition  $\langle T \rangle_{\psi} := \langle \psi, T(\psi) \rangle_{\mathscr{H}} = \int \mathrm{id}_{\mathscr{H}} E_{\psi}$ . Definiere auch  $\Delta T := T - \mathrm{id}_{\mathscr{H}}(\langle T \rangle_{\psi})$ . Dann definiere

$$\tilde{\psi}_A := \Delta A(\psi), \quad \tilde{\psi}_B := \Delta B(\psi).$$

Damit ist dann die Quadratintegralauswertung

$$\int \left| \tilde{\psi}_A \right|^2 := \int \tilde{\psi}_A^* \cdot \tilde{\psi}_A := \int (\Delta A(\psi))^* \cdot \Delta A(\psi)$$

$$\stackrel{sym.}{=} \int \psi^* \cdot (\Delta A)^2(\psi) = \left\langle \psi, (\Delta A)^2(\psi) \right\rangle_{\mathscr{H}} =: \left\langle \Delta A^2 \right\rangle = \Delta A^2$$

und analog für  $\Delta B$ . Wir definieren nun  $\psi_{A,B} := \tilde{\psi}_{A,B} / \sqrt{\int \left| \tilde{\psi}_{A,B}^2 \right|} \text{ mit } \tilde{\psi}_{A,B} := \tilde{\psi}_A \text{ oder } \tilde{\psi}_B$ . Wir sortieren  $\psi_A, \psi_B$  nun einer komplexen Zahl  $z \in \mathbb{C}$  zu. Hierfür nutzen wir die Form

Skript

 $z_{\pm}:=\psi_A\pm \stackrel{\circ}{i}\cdot \psi_B$ . Für die Quadratintegralauswertung folgt damit im komplexen Betrag

$$0 \le \int |z_{\pm}|_{\mathbb{C}}^2 = \int |\psi_A|_{\mathbb{R}}^2 + \int |\psi_B|_{\mathbb{R}}^2 \pm \mathring{\imath} \cdot \left( \int \psi_A^* \cdot \psi_B \mp \int \psi_B^* \cdot \psi_A \right),$$

wobei wir die komplexe Betragsdefinion  $|z| = z^* \cdot z$  ausgenutzt haben. Mit  $\int |\psi_A|^2 = 1 = \int |\psi_B|^2$  folgt zusammengefasst

$$1 \ge \mp \stackrel{\circ}{i} \cdot \int (\psi_A^* \cdot \psi_B - \psi_B^* \cdot \psi_A).$$

Multiplizieren unter Ausnutzung der Definitionen  $\tilde{\psi}_A$  und  $\tilde{\psi}_B$  mitsamt der Symmetrie von A,B folgt weiter

$$\Delta A \circ \Delta B \ge \mp \stackrel{\circ}{i} \cdot \int (\tilde{\psi}_A^* \cdot \tilde{\psi}_B - \tilde{\psi}_A \cdot \tilde{\psi}_B^*) = \langle \psi, (\Delta A \circ \Delta B - \Delta B \circ \Delta A)(\psi) \rangle_{\mathscr{H}}.$$

Wir erkennen hier sofort den Kommutator  $\Delta A \circ \Delta B - \Delta B \circ \Delta A = [A, B]$ . Hier lässt sich nun eine Fallunterscheidung durchführen; wir fahren mit A, B nicht scharf fort. Mit Erwartungswerten umgeschrieben folgt

$$\Delta A \circ \Delta B \ge \mp \frac{\mathring{i}}{2} \cdot \langle [A, B] \rangle_{\psi}.$$

Die rechte Seite bleibt dabei immer reell, trotz des anmultiplizierten  $\hat{i}$ s. In Betragsschreibweise folgt damit  $\Delta A \circ \Delta B \geq 1/2 \cdot |\langle [A,B] \rangle_{\psi}|$ . Daraus ergibt sich eine Optimierungsaufgabe der Funktion  $f := (|\langle [A,B] \rangle_{\psi}|)_{\psi \in \mathscr{H}}$ .

.....

- $\square$  Betrachte die Heisenbergsche Unschärferelation in dieser Form für den Ort- und Impulsoperator ( $\lozenge$ 49) X, P. Folgere unsere oben zuerst kennengelernte Form der Heisenbergschen Unschärferelation.
- A, F. Folgere unsere oben zuerst kennengeiernte Form der Heisenbergschen Unschaftereiation.  $\square$  Mit  $E: \mathscr{B}(\sigma(T)) \to L_S(\mathscr{H})$  ist ein  $Spektralma\beta$  gemeint. Überlege dir ein Beispiel für (\$50)

ein solches. Ist  $E:=((F_f^*\circ\lambda)(A))_{A\in\mathscr{B}(\mathbb{R})}$  mit  $F:=\left((x^*\cdot f(x))_{f\in L_S(\mathbb{R})}\right)_{x\in\mathbb{R}}$  für  $f\in L_S(\mathbb{R})$  ein Spektralmaß?

......

## 2 Lösen von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung

Die Idee der Betrachtung eines eindimensionalen Problems ist zur Übung der Lösung bereits kennengelernter Schrödingergleichungen. Diese Problemstellung eignet sich hierbei besonders aufgrund des relativ geringen Rechenaufwandes und liefert gleichzeitig die Grundlagen allgemeiner quantenmechanischer Probleme. Daß die Problemstellung also nicht vollkommen aus der Luft gegriffen ist, kann man auch an sogenannten Karbon Nanoröhren oder Halbleiter Nanodrähten erknennen; Hier gelten die Lösungen real in guter Näherung, weiter motiviert die eindimensionale Problemstellung komplexere, separierbare Probleme. Setzt man also die eindimensionale Wellenfunktion  $\psi(t,x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3)$  in die zeitabhängige Schrödingergleichung ein, so erhält man

$$\mathring{i} \, \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 \psi(t, x) + V(t, x) \cdot \psi(t, x).$$

*VL 9* 11.05.2023, 10:00

Für den zeitunabhängigen Fall ergibt sich mit Abkürzung des Hamilton Operators  ${\cal H}$  die Gleichung

$$H(\psi(t,x)) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 \psi(t,x) + V(t,x) \cdot \psi(t,x) \quad (=:E_V(\psi(t,x))).$$

.....

(\$51)  $\square$  Kläre die Definition von E.

......

Das Lösungsvorgehen stellt sich nun wie folgt dar: Löse die zeitunabhängige Schrödingergleichung  $F:=(E_V(\psi(t,x)))_{V\in\mathscr{L}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^3)}$  mit  $H(\psi(t,x))=F(V)$ . Dabei ist der einfachste Fall zunächst  $V\in konstant$ , sodaß man mit freien Teilchen zutun hat und ebene Wellenfunktionen verwenden kann. Der nächste Fall wäre  $V\in stückweisekonstant$ . Hier haben wir optisch mit Funktionen der Form

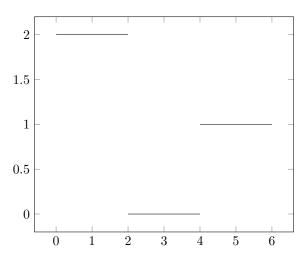


Abbildung 3: Beispiel für stückweise konstante Funktion  $V \in Abb([0,6],\mathbb{R})$ .

.....

(\$52)  $\square$  Definiere die Mengen konstant und  $st \ddot{u}ckweisekonstant$  für  $\mathscr{L}^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3)$ .

.....

## Randbedingungen an Unstetigkeitsstellen

Für ein V=0 ergibt sich als Lösung von  $H(\psi(t,x))=F(V)$  eine Exponentialfunktion der Form  $\psi(t,x)=C_0\cdot \exp\left(\hat{\imath}\cdot\langle x,k\rangle\right)$  für  $C_0\in\mathbb{R},\ k\in\mathbb{R}^3$  als Fittingkonstanten. Mit  $E=\hbar^2\dot{k}^2/(2m)$  folgt noch  $k=\pm 1/\hbar\cdot\sqrt{2\cdot m\cdot E}$ . Für allgemeinere  $V\in konstant$  haben wir für  $H(\psi(t,x))=F(V)$  zunächst

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 \psi(t,x) = (E-V) \cdot \psi(t,x) \implies \psi(t,x) = C_0 \cdot \exp\left(\mathring{\imath} \cdot \langle k, x \rangle\right)$$

mit  $k = (\pm 1/hbar \cdot \sqrt{2m \cdot (E - V(t, x))})_{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3}$ . Hier müssen wir nun eine Fallunterscheidung für (i)  $E(t, x) \geq V(t, x)$  und (ii) E(t, x) < V(t, x) durchführen:

( \$53 )

Theoretische Physik II Skript

(i) Es ist dann k(t,x) eine Zahl in  $\mathbb{R}$ , sodaß für die Normierung über eine kompakte Menge  $M_{L,2} := \{x \in \mathbb{R}^3 : ||x||_2 \le L/2\}$  im Quadratintegral

$$1 \stackrel{!}{=} |C_0| \cdot \int \left| \exp \left( \stackrel{\circ}{\imath} \cdot \langle k, x \rangle \right) \right| \, \lambda_{M_{L,s}} \left( dx \right) = \left| C_0 \right|^2 \cdot L,$$

also  $C_0=1/L$ . Für  $L\to\infty$  folgt also  $C_0\to 0$ , der Erwartungswert bleibt jedoch erhalten.

(ii) Dann ist k(t,x) im eindimensionalen eine skalierte komplexe Zahl  $\pm \hbar \cdot \hat{i}$  für ein  $\hbar \in \mathbb{R}_{>0}$ . Wir erhalten ein gedämpftes  $\psi$  mit  $\psi(t,x) = C_0 \cdot \exp(\mp \hbar \cdot x)$ , sodaß die Normierung  $C_0 \approx \sqrt{\hbar/(\sinh(\hbar \cdot L))}$  folgt. Für  $L \to 0$  folgt also  $C_0 \to 0$ , der Erwartungswert ist allerdings nicht mehr überall erhalten:  $\langle x \rangle \approx \mp L/2$ . Es ist  $\psi$  also nur auf endlichen Intervallen normierbar.

□ Rechne nach, daß im Fall (i) der Erwartungswert erhalten bleibt.

An einer Potentialstufe ist  $\psi$  also stetig differenzierbar. Dies wollen wir nun nachrechnen.

## Annahmen

Angenommen wir haben ein  $V \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$  mit einer endlichen Unstetigkeit in  $x_0$ . Nach Form der zeitunabhängigen Schrödingergleichung erhalten wir

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{2}\psi(t,x) = -\frac{2m}{\hbar}\cdot\left(E - V\right)(t,x)\cdot\psi(t,x).$$

.....

 $\square$  In der Vorlesung wurde eine Fallunterscheidung über die (Un-)Stetigkeit von  $\psi$  bei  $x_0$  (\$54 durchgeführt, indem die (zweite) "Ableitung" berechnet wurde. Es wurde gefolgert " $\psi$  ist stetig". Recherchiere nach einer Begründung für diese Aussage. Beachte die *schwache Ableitung*.

.....

## Zusammenfassen

Falls |V(x)| < 0 für alle Argumente x, dann folgt die Stetigkeit der Lösung  $u = \psi$  auf dem ganzen Lösungsintervall. Ist V eine Verklebung von  $\delta$  Integralen, so folgt die Stetigkeit von  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(t,x)$  jedoch nicht.

#### 2.0.1 Potentialbarrieren

Beachte hierzu als Beispiel das Potential

$$V := \left( \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \ge 0 \end{cases}_{(t,x) \in \mathbb{R}^2}, \quad V_0 \in \mathbb{R}.$$

Dann gibt es die Fälle (i)  $E(t,x) > V_0$  und (ii)  $E(t,x) < V_0$ . In klassischer Betrachtung fällt zunächst auf, daß der Bereich  $x \ge 0$  nicht erreichbar sein.

.....

(№55) □ Vermute zunächst, ob diese Behauptung auch für die Quantenmechanik gilt.

.....

Für den Impuls ergibt sich in (i)  $p = \hbar \cdot k = \sqrt{2m \cdot E}$  und in (ii)  $p = \hbar \cdot k = \sqrt{2m \cdot (E - V_0)}$ . Wieder führt uns unsere Betrachtung in eine Fallunterscheidung (i)  $E \geq V$ , (ii)  $0 \leq E(t, x) < V(t, x)$ :

- (i) Für  $\overline{k}(t,x) := 1/\hbar \cdot \sqrt{2m \cdot (E(t,x) V_0)} \in \mathbb{R}$  ergibt sich die Lösung  $u(t,x) = C_0 \cdot \exp\left(\pm \stackrel{\circ}{i} \cdot \overline{k}(t,x) \cdot x\right)$ .
- (ii) Für  $\kappa(t,x) := 1/(\hat{\imath} \cdot \hbar) \cdot \sqrt{2m \cdot |E(t,x) V_0|} \in \mathbb{R}$ , ist  $\overline{k}(t,x) := \hat{\imath} \cdot \kappa$  mit  $u(t,x) = \exp\left(\hat{\imath} \cdot \overline{k}(t,x) \cdot x\right)$  eine Lösung. Es handelt sich nun um eine exponentiell gedämpfte Wellenfunktion im klassisch verbotenen Gebiet.

Für E(t,x)<0 ergibt sich dabei keine normierbare Lösung. Damit erhalten wir die Verklebung

$$\psi(t,x) := \left( C_0 \cdot \begin{cases} \exp\left( \stackrel{\circ}{\imath} \cdot k(t,x) \cdot x \right) + \rho \cdot \exp\left( - \stackrel{\circ}{\imath} \cdot k(t,x) \cdot x \right) & x < 0 \\ \tau \cdot \exp\left( \stackrel{\circ}{\imath} \cdot \overline{k}(t,x) \cdot x \right) & x \ge 0 \end{cases}_{(t,x) \in \mathbb{R}^2}$$

mit Transmissionskoeffizient  $\kappa \in \mathbb{R}$  und Reflexionskoeffizient  $\rho \in \mathbb{R}$ . Beachten wir nun die kritische Stelle x=0, dann ergeben sich durch die Stetigkeitsbedingung an  $\psi, \psi'$  die Bedingungen

$$1 + r = t$$
  $\mathring{i} \cdot (k - \overline{k} \cdot \rho) = \mathring{i} \cdot \overline{k} \cdot \tau.$ 

Durch Auflösen ergibt sich

$$\rho = \frac{k - \overline{k}}{k + \overline{k}} \in \mathbb{C} \qquad \tau = \frac{2 \cdot k}{k + \overline{k}} \in \mathbb{C}.$$

Die Funktionsverklebung  $\psi$  stellt mit diesen Koeffizienten also eine Lösung der Schrödingergleichung.

.....

- ( $\infty$ 56)  $\square$  Überlege dir, an welcher Stelle die Eindimensionalität von x gebraucht wurde. Lässt sich die Lösung auf  $x \in \mathbb{R}^d$  erweitern?
- ( $\infty$ 57)  $\square$  Schreibe in einer Tabelle auf, wie  $k, \overline{k}$  in welchem Fall definiert ist.
- (§58)  $\square$  Setze das Ergebnis  $\psi$  in den Wahrscheinlichkeitsstrom  $j:=\mathring{i}\,\hbar/(2m)\cdot(\psi^*\cdot\psi'-\psi\cdot(\psi')^*)$  ein. Wofür steht der Ausdruck  $\hbar\cdot k/m$ ?

.....

Mit der Aufgabe erhalten wir den Wahrscheinlichkeitsstrom

$$j(t,x) = |C_0|^2 \cdot \frac{p(t,x)}{m} \cdot \begin{cases} 1 - |\rho|_{\mathbb{C}}^2 & x \le 0 \\ \left|\tau \cdot \sqrt{\overline{k}/k}\right|_{\mathbb{C}}^2 & x > 0 \end{cases}.$$

# Literatur