

II. Einteilchenquantenmechanik in 1D

klassische Hamiltonfunktion in 3D

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

Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad [x, p_x] = i\hbar$$

in Ortsdarstellung

$$(92) \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

in Impulsdarstellung

$$(93) \quad \hat{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(i\vec{\nabla}_k)$$

Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

$$\hat{H} |\phi_E\rangle = E |\phi_E\rangle$$

Orbdarstellung

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$(94) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

Impulsdarstellung

$$\tilde{\psi}(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \psi \rangle$$

$$(95) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) + V(i\vec{\nabla}_{\vec{k}}) \tilde{\psi}(\vec{k}, t)$$

2.1 Wahrscheinlichkeitsdichte und Kontinuitätsgleichung

Wie bereits in der Einführung gezeigt entspricht

$$(96) \quad \boxed{g(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\langle \vec{r} | \psi \rangle|^2}$$

der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{r}, t) &= \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} \\ &= \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi^* + \cancel{\frac{i}{\hbar} V(\vec{r}) \psi^*} \right) \psi \\ &\quad + \psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi - \cancel{\frac{i}{\hbar} V(\vec{r}) \psi} \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot [\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]$$

$$(97) \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Es gilt

(98)

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

Kontinuitätsgleichung

= Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

Bem:

mit $\psi(\vec{r}, t) = \sqrt{S} e^{iS/\hbar}$

(99)

$$\vec{j} = \frac{S}{m} \vec{\nabla} S$$

Phasengradient
 $\Leftrightarrow$ Stromdichte

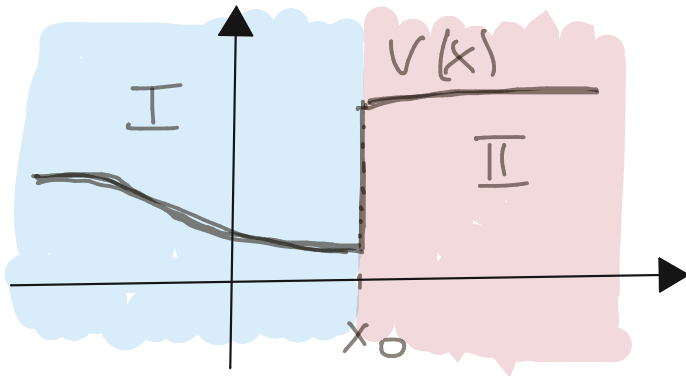
Aus der Kontinuitätsgleichung sehen wir sofort eine Bedingung an ψ und $\vec{j}$

Kontinuitätsgleichung $\Rightarrow \vec{j}$ stetig an Grenzflächen

Für endliche Potentiale $V(\vec{r})$ müssen $\psi(\vec{r})$ und $\vec{\nabla} \psi(\vec{r})$ stetig sein!

Übergangsbedingungen in 1D

(100)



$$\begin{aligned}\psi_I(x_0) &\stackrel{!}{=} \psi_{II}(x_0) \\ \psi_I'(x_0) &\stackrel{!}{=} \psi_{II}'(x_0)\end{aligned}$$

Ausnahme falls $\psi(x_0) = 0$ muß $\frac{\partial}{\partial x} \psi$ nicht mehr stetig sein

2.2 Freies Teilchen in 1D

Hier
(101) $V(x) \equiv 0$

Der Vergleich von Gln. (92) und (93) zeigt, daß für ein freies Teilchen die Impulsdarstellung vorzuziehen ist

$$(102) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(k, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k, t)$$

Lösung (im k Raum

$$(103) \quad \underline{\underline{\tilde{\psi}(k, t) = \tilde{\psi}(k, t_0) \exp\left\{-\frac{i\hbar k^2}{2m}(t - t_0)\right\}}}}$$

Die Lösung im Ortsraum erhält man durch

Fouriertransformation

$$\begin{aligned}
 (104) \quad \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ikx} \tilde{\psi}(k, t_0) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}(t-t_0)} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{ikx} e^{-iky} \psi(y, t_0) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}(t-t_0)}
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (105) \quad \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \underline{G(x, y; t, t_0)} \psi(y, t_0)$$

$G(x, y; t, t_0)$ nennt man Propagator des freien Teilchens

$$(106) \quad G(x, y; t, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ik(x-y)} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}(t-t_0)}$$

komplexes Gaußintegral

Bem: Gaußintegrale

$$(i) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-\alpha y^2} = I_1 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (107)$$

$$I_1^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-\alpha y^2}$$

$$= \int dx \int dy e^{-\alpha(x^2+y^2)} = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\alpha r^2}$$

sphärische
Polarkoordinaten

$$= 2\pi \int_0^\infty dr r e^{-\alpha r^2} \quad \xi = r^2 \quad d\xi = 2r dr$$

$$= \pi \int_0^\infty d\xi e^{-\alpha \xi} = \frac{\pi}{\alpha} \quad \leadsto I_1 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \square$$

$$(ii) I_2 = \int_{-\infty}^\infty dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \int_{-\infty}^\infty dy e^{-\alpha(y-y_0)^2} e^{\alpha y_0^2}$$

quadratische
Ergänzung

$$\alpha(y-y_0)^2 - \alpha y_0^2 = \alpha y^2 - \beta y$$

$$\cancel{\alpha y^2} - 2\alpha y_0 y = \cancel{\alpha y^2} - \beta y$$

$$\beta = 2\alpha y_0 \quad \underline{\underline{y_0 = \frac{\beta}{2\alpha}}}$$

d.h. mit $z = y - y_0$

$$I_2 = \int_{-\infty}^\infty dz e^{-\alpha z^2} e^{\alpha y_0^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha}$$

$$(108) \quad I_2 = \int_{-\infty}^\infty dy e^{-\alpha y^2} e^{\beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha}$$

Bem: geht auch für komplexe α mit $\operatorname{Re}[\alpha] > 0$

Damit ergibt sich für den Propagator (Hier ist $\text{Re}[x]=0$, das Integral muß daher streng genommen regularisiert werden genauer später)

$$(109) \quad G(x, y; t, t_0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i (t-t_0)} \right)^{1/2} e^{i \frac{m(x-y)^2}{2\hbar(t-t_0)}}$$

Man kann durch leichte Rechnung zeigen, daß gilt

$$(110) \quad \left. \begin{aligned} \langle \hat{p}(t) \rangle &= \langle \hat{p}(0) \rangle \\ \Delta p^2(t) &= \Delta p^2(0) \end{aligned} \right\} \text{klar! Impuls ist Erhaltungsgröße}$$

aber

$$(111) \quad \Delta x^2(t) = \Delta x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2(0)}$$

Auseinanderlaufen des Wellenpaketes im Ortsraum

Bspl: Gaußsches Wellenpaket

$$(112) \quad \psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}}$$

offensichtlich mit Gl 107

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,0)|^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \\
 (113) \quad &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \sqrt{2\pi\sigma_x^2} = 1
 \end{aligned}$$

Die Impulsraumwellenfunktion hat eine einfache Dynamik, da der Impuls für ein freies Teilchen eine Erhaltungsgröße ist

$$\tilde{\psi}(k,t) = \tilde{\psi}(k,0) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

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

Gl. (60) ↑

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}$$

Gl. (108)

$$= \frac{1}{\cancel{\sqrt{2\pi}} (2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} \cancel{\sqrt{\pi 2\sigma_x^2}} e^{-\frac{k^2}{2}\sigma_x^2}$$

$$\begin{aligned}
 (114) \quad &= \left(\frac{\sigma_x^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{k^2\sigma_x^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} e^{-\frac{k^2}{2\sigma_k^2}}
 \end{aligned}$$

mit

$$(115) \quad \underline{\underline{\sigma_k = \frac{1}{\sigma_x}}}$$

wieder Groß!

$$\hat{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \sigma_k^2}} e^{-\frac{k^2}{2\sigma_k^2}} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m}t}$$

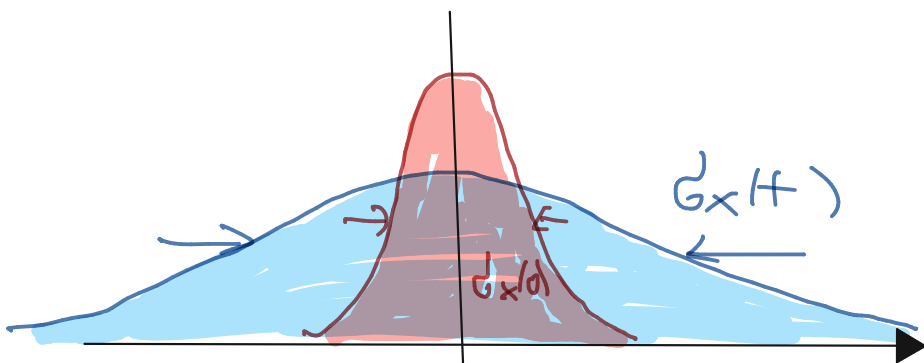
$$(11b) \quad = \frac{1}{\sqrt{2\pi \sigma_k^2(t)}} e^{-\frac{k^2}{2\sigma_k^2(t)}}$$

$$(118) \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\sigma_k^2(t)} = \frac{1}{\sigma_k^2} + \frac{i\hbar t}{2m} = \sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m}$$

$$\Rightarrow (119) \quad \psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi \sqrt{\sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m}})^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}}$$

$$\begin{aligned} \text{Mit } \exp\left\{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}\right\} &= \exp\left\{-\frac{x^2(\sigma_x^2 - \frac{i\hbar t}{2m})}{4(\sigma_x^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2})}\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_x^2})}\right\} \exp\left\{\frac{i\hbar x^2 t}{8m(\sigma_x^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2})}\right\} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (120) \quad \sigma_x^2(t) = \sigma_x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_x^2(0)} \quad \text{wie Gl. (111)}$$



Was bedeutet es wenn Teilchen in der Mikrowelt "auseinanderlaufen"?

Zeit bis $\Delta X(t=T) = 2 \Delta X(0)$

G.l. (120) $4 \Delta X(0)^2 = \Delta X(0)^2 + \frac{\hbar^2 T^2}{4m^2 \Delta X(0)^2}$

$\Rightarrow$

$$T = 2\sqrt{3} \frac{m}{\hbar} \Delta X(0)^2$$

• Elektron mit $\Delta X(0) = 1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$

$$m = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$T \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ s} = 30 \text{ ns} \text{ schnell!}$$

• Marmel mit $\Delta X(0) = 1 \text{ mm} = 10^{-3} \text{ m}$

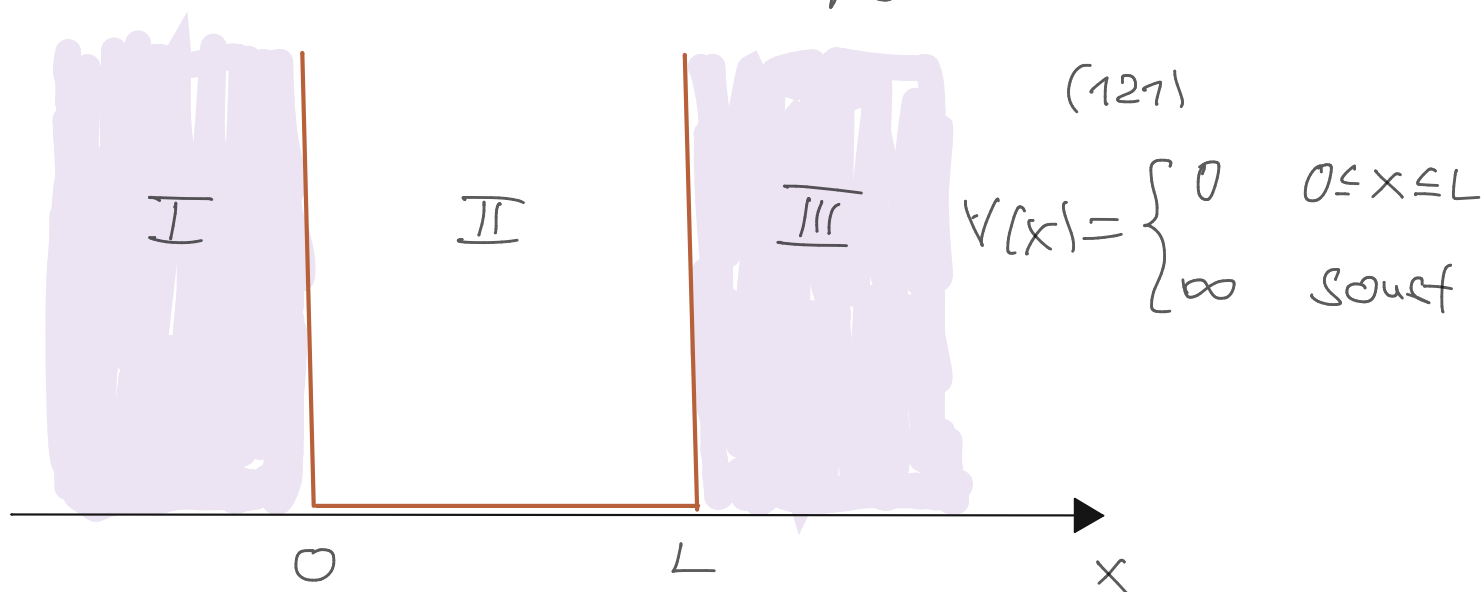
$$m = 10 \text{ g} = 10^{-1} \text{ kg}$$

$$T \approx 3 \cdot 10^{27} \text{ s} \sim 10^{20} \text{ Jahre!}$$

$\Rightarrow$ Auseinanderlaufen quantenmechanischer Wellenpakete ist in der makroskopischen Welt ohne Belang

2.3 Gebundene Zustände im unendlich hohen Kastenpotential

Gebundene Zustände spielen im Mikrokosmos eine große Rolle z.B. beim Verständnis der Atome. Jetzt schauen wir uns mal das einfachste Beispiel an: ein unendlich hohes Kastenpotential in 1D



stationäre SGL

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

gewohnte Betrachtung in den Raumgebieten I, II, III

I, III	$V(x) = \infty$	$\leadsto \phi_E(x) \equiv 0$ (122)
--------	-----------------	-------------------------------------

II	$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_E''(x) = E \phi_E(x)$	(123)
----	---	-------

Übergangsbedingung Gl. (100)

$$(124) \quad \phi_E(x=0) = \phi_E(x=L) = 0$$

Für welche Werte E existiert eine normierbare Lösung von (123)?

• $\boxed{E \leq 0}$ $\phi_E(x) \sim \exp \left\{ \pm \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} x \right\}$
 $\Downarrow$ zu Randbedingung (124) $\Rightarrow \nexists$ Lösung

allgemein:

$\nexists$ erlaubten Lösungen der stationären Schrödingergleichung für Werte $E < \min(V(x))$

• $\boxed{E > 0}$ Lösung d. DGL (123)

$$(125) \quad \phi_E(x) = A \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$$

mit (124)

$$(126) \quad \phi_E(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{A = 0}}$$

$$\phi_E(L) = 0 \quad B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$B = 0$$



$$\underline{\underline{\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi}}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$
 $n = 0$ nicht erlaubt

Wir sehen:

Forderung nach normierbarer Wellenfunktion
bzw. Randbedingungen fixieren diskrete
Energiewerte Quantisierung von E

hier
(127)

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

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

(128)

$$\phi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Eigenfunktionen

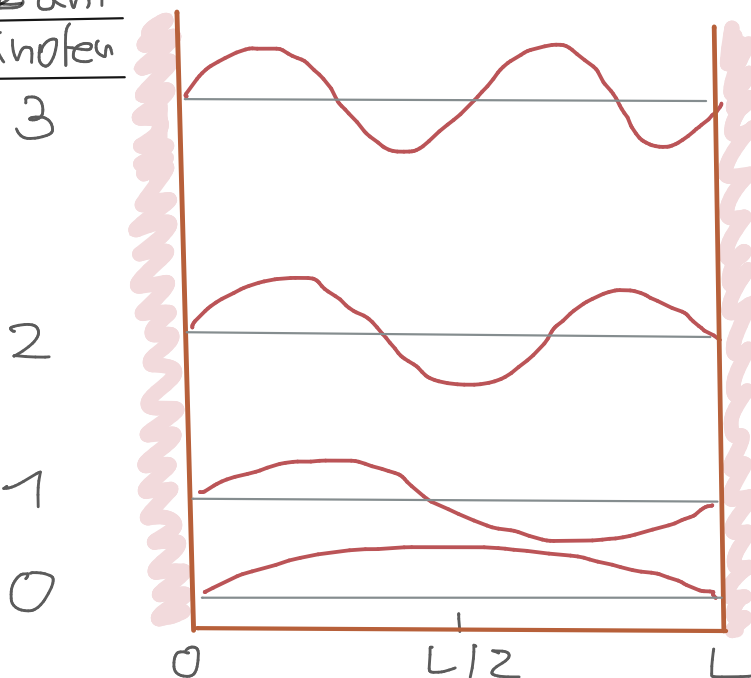
$B_n = ?$ folgen aus Normierung

$$\int_0^L dx |\phi_n(x)|^2 = B_n^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \stackrel{!}{=} 1$$

(129)

$$\underline{\underline{B_n = \sqrt{\frac{2}{L}}}}$$

Anzahl
Knoten
3



n n^2

4 16

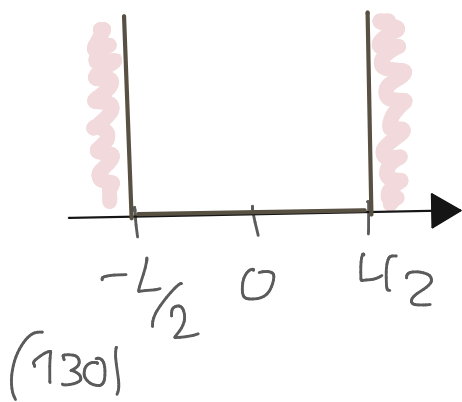
3 9

2 4

1 1

- 66 -

Zur Vereinfachung verschieben wir jetzt das Potential um $L/2$



$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x + n\frac{\pi}{2}\right)$$

$$n = 2m+1$$

$$\phi_n(x) = \phi_n(-x) \quad \text{symmetrisch}$$

$$n = 2m$$

(131)

$$\phi_n(x) = -\phi_n(-x) \quad \text{antisymmetrisch}$$

Def: Inversion (Paritätsoperator)

(132)

$$\hat{\Pi} \phi(x) \equiv \phi(-x)$$

$$\hat{\Pi}^2 = \mathbb{1}$$

$$\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}$$

hermitisch und unitär

Eigenwerte und Eigenfunktionen von $\hat{\Pi}$

$$\hat{\Pi} \phi(x) = \lambda \phi(x)$$

$$\phi(x) = \hat{\Pi}^2 \phi(x) = \lambda^2 \phi(x)$$

$$(133) \quad \lambda^2 = 1$$

$$\lambda_{\pm} = \pm 1$$

$$\lambda_{\pm} = \pm 1$$

$\phi(x)$ sei beliebige Funktion

$$(134) \quad \phi_+(x) \equiv (1 + \hat{\Pi}) \phi(x) = \phi(x) + \phi(-x)$$

$$(135) \quad \phi_-(x) \equiv (1 - \hat{\pi}) \phi(x) = \phi(x) - \phi(-x)$$

offensichtlich gilt

$$(136) \quad \hat{\pi} \phi_+(x) = \phi_+(x) \quad \hat{\pi} \phi_-(x) = -\phi_-(x)$$

$\Rightarrow \phi_{\pm}(x)$ Eigenfunktionen von $\hat{\pi}$ zu $\lambda_{\pm} = \pm 1$

Nun gilt

$$(137) \quad [\hat{\pi}, \hat{p}_m^2] = 0$$

D.h. falls auch gilt

$$(138) \quad [\hat{\pi}, V(\hat{x})] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad V(x) = V(-x)$$

folgt $[\hat{\pi}, \hat{H}] = 0$ und $\hat{\pi}$ ist Erhaltungsgröße

Eigenfunktionen eines symmetrischen Potentials (138) sind entweder symmetrisch (ϕ_+) oder anti-symmetrisch (ϕ_-)

Die eben für das Kastenpotential gefundenen Eigenschaften können wir auf allgemeine gebundene Zustände in 1D verallgemeinern:

Allgemeine Eigenschaften gebundener Zustände in 1D

- (i) diskrete Eigenfunktionen von H können stets reell gewählt werden außer es liegen Randbedingungen vor die komplexe Lösungen forcieren.

Folgerung $j = \frac{\hbar}{m} \frac{d}{dx} S \stackrel{!}{=} 0 \quad \psi = \sqrt{\xi} e^{iS/\hbar}$

- (ii) es gilt der Knotensatz (reelle ϕ_n)

Falls $E_m > E_n$ hat $\phi_m(x)$ mindestens eine Nullstelle (Knoten) zwischen zwei Nullstellen (Knoten) von $\phi_n(x)$

Beweis: $E_m > E_n \quad a < b$ Nullstellen von ϕ_n

O.B.d.A. $\phi_n(x) > 0$ für $a < x < b$

$$\int_a^b dx \phi_n(x) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_m''(x) + V \phi_m(x) = E_m \phi_m(x) \right|$$

$$\int_a^b dx \phi_m(x) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_n''(x) + V \phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \right|$$

subtrahieren der Gleichungen $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_a^b dx \underbrace{(\phi_n \phi_m'' - \phi_m \phi_n'')}_{\frac{d}{dx} (\phi_n \phi_m' - \phi_m \phi_n')} = (E_m - E_n) \int_a^b dx \phi_m(x) \phi_n(x)$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\phi_n \phi_m'}_0 \Big|_a^b - \underbrace{\phi_m \phi_n'}_0 \Big|_a^b \right) = (E_m - E_n) \int_a^b dx \phi_m \phi_n$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\phi_m(b) \phi_n'(b)}_{<0} - \underbrace{\phi_m(a) \phi_n'(a)}_{>0} \right) = (E_m - E_n) \int_a^b dx \phi_m \phi_n$$

$\Rightarrow \phi_m(x)$ muß im Intervall $a \leq x \leq b$ Vorzeichen wechseln

falls nicht und $\phi_m > 0$ linke Seite negativ
rechte Seite positiv $\downarrow$

und $\phi_m < 0$ linke Seite positiv
rechte Seite negativ $\downarrow$

2.4 Gebundene und Streuzustände in einem endlichen Kastenpotential

