

II. Einteilchenquantenmechanik in 1D

Klassische Hamiltonfunktion in 3D

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

Hamiltonoperator

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

$$[x, p_x] = i\hbar$$

in Ortsdarstellung

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

in Impulsdarstellung

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

Schrödinger Gleichung

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

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

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

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

die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum

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

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

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

Wahrscheinlichkeitsdichte

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

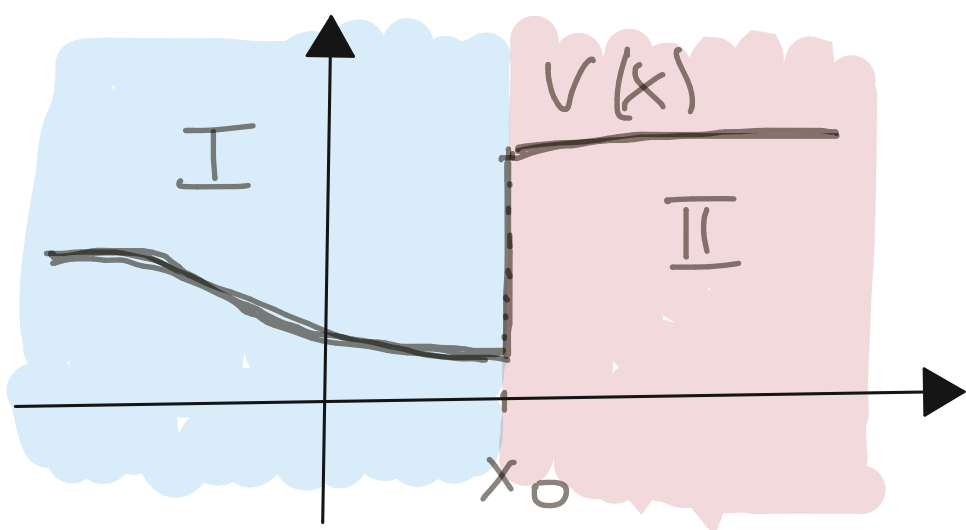
Aus der Kontinuitätsgleichung sehen wir sofort eine Bedingung an ψ und $\vec{j}$

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)



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

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 vorteilhafter 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

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

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

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

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

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

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

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

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

quadratische
Ergänzung $\uparrow$

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

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

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

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

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

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

Gl. (60) $\uparrow$

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

Gl. (108)

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

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

mit

(115)

$$\underline{\underline{\sigma_k = \frac{1}{\sigma_x}}}$$

wieder Grenzfall!

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(k,t) &= \frac{1}{(2\pi \sigma_k^2)^{1/4}} e^{-\frac{k^2}{2\sigma_k^2}} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m}t} \\ (11b) \quad &= \frac{1}{(2\pi \sigma_k^2)^{1/4}} e^{-\frac{k^2}{2\sigma_k^2(t)}}\end{aligned}$$

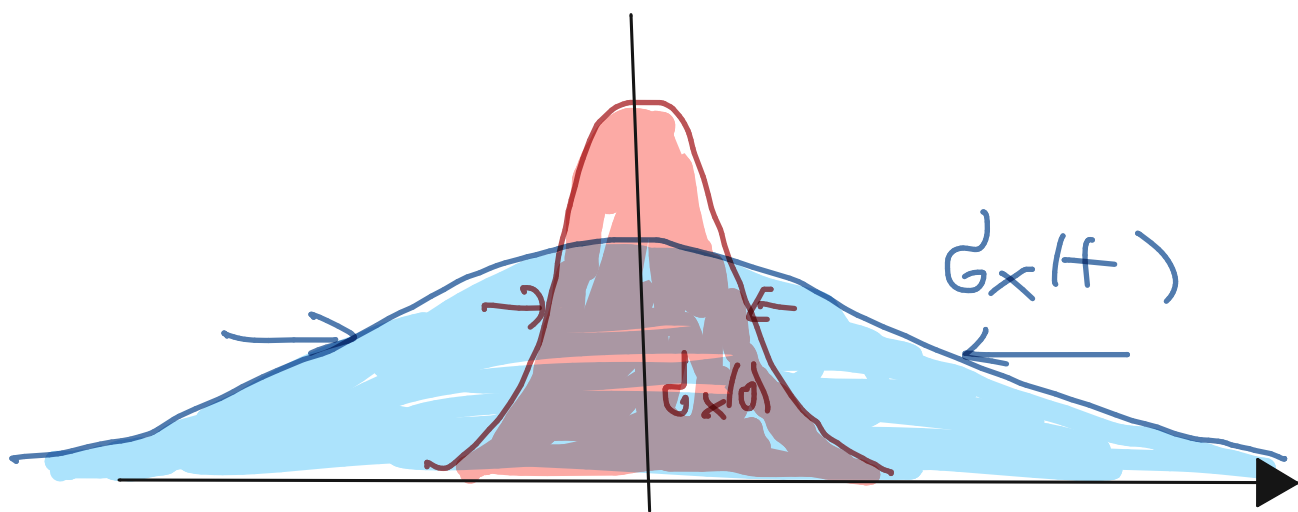
mit

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

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

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

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



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

$$m = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad \hbar \cong 10^{-34} \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}}$$

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

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

$$m = 1 \text{ g} = 10^{-3} \text{ kg}$$

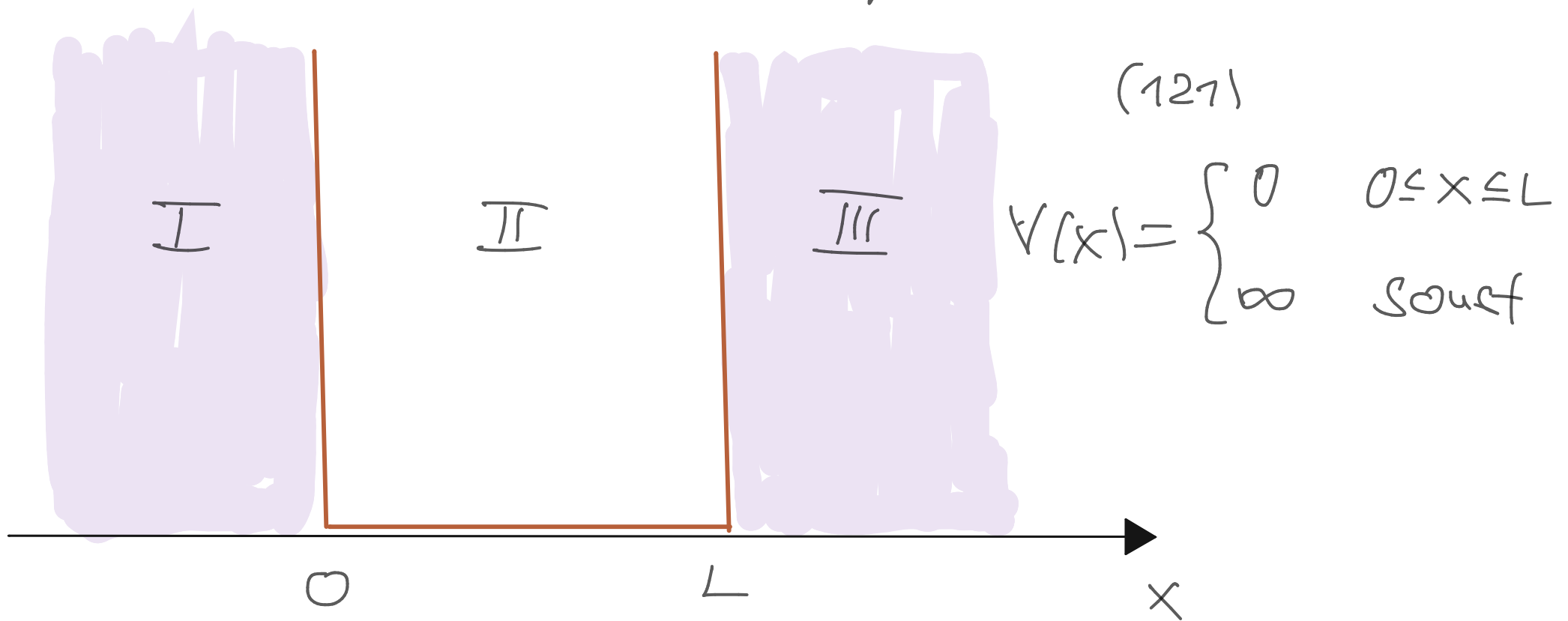
$$T \cong 3 \cdot 10^{22} \text{ s} \cong 3 \cdot 10^{16} \text{ Jahre}$$

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

04.05. $\rightarrow$

2.3 Gebundene Zustände im unendlich hohem 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

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

gehörnte Betrachtung in den Raumgebieten I, II, III

$$\boxed{\text{I, III}} \quad V(x) = \infty \quad \leadsto \quad \phi_E(x) \equiv 0 \quad (122)$$

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

Übergangsbedingung Gl. (100)

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

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

• $E \leq 0$ $\phi_E(x) \sim \exp \left\{ \pm \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} x \right\}$

$\Downarrow$ zu Randbedingung (124) $\Rightarrow$ ~~keine~~ Lösung

allgemein:

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

• $E > 0$ 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)

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

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

$$B = 0$$

$\Downarrow$

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

$n = 1, 2, 3, \dots$
 $n = 0$ 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)

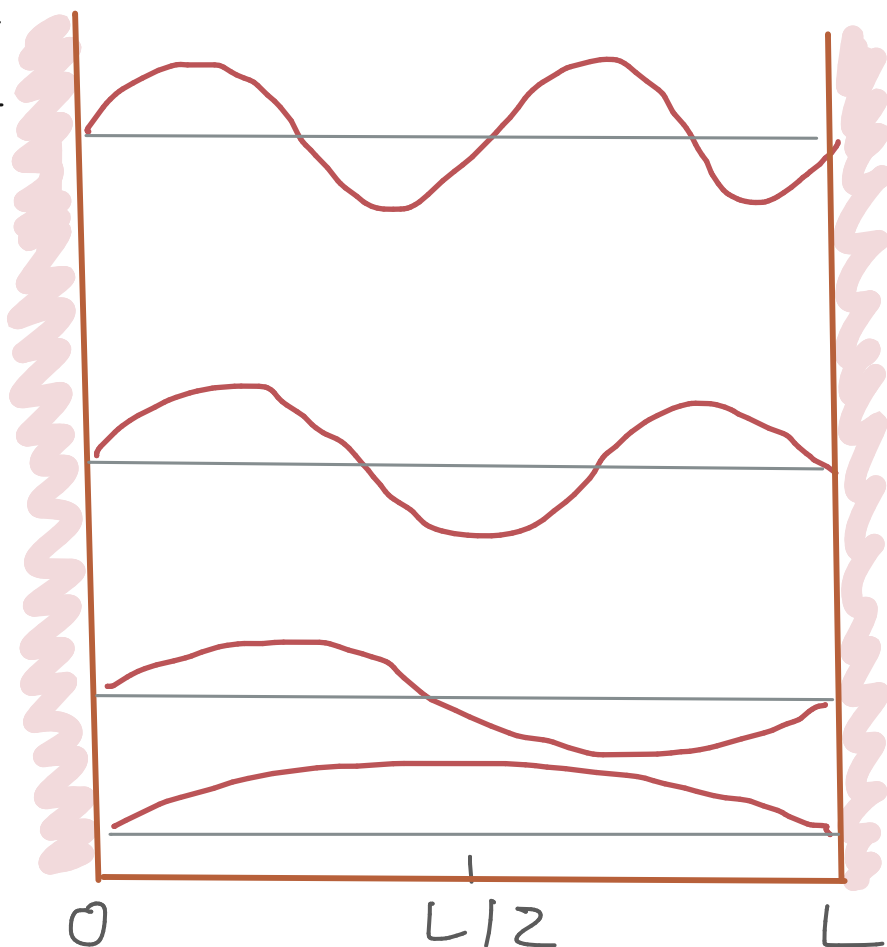
$$\underline{\underline{B_n = \sqrt{\frac{2}{L}}}}$$

Anzahl
Knoten
3

2

1

0



n n^2

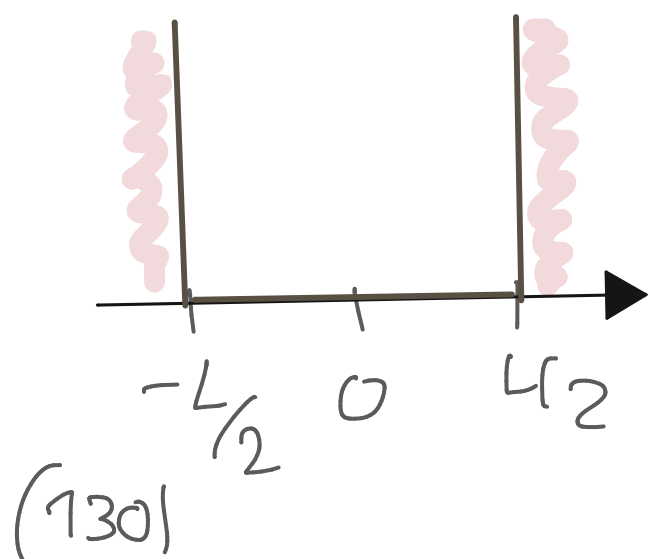
4 16

3 9

2 4

1 1

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)

$$[\hat{\pi}, \hat{p}_m^2] = 0$$

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 stetig gewählt werden außer es liegen Randbedingungen vor die komplexe Lösungen forcieren.

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

- (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: $E_m > E_n$ $a < b$ 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 $\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

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

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

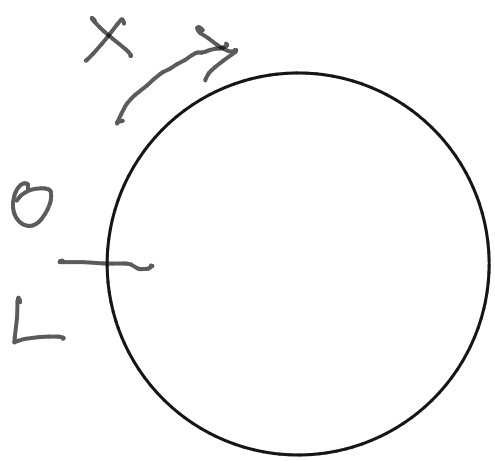
und $\phi_m < 0$ linke Seite positiv
rechte Seite negativ $\downarrow$

2.4 Freies Teilchen mit periodischen

Randbedingungen, kontinuierliche Zustände

Jetzt wollen wir uns freie Teilchen in einem endlichen System der Länge L mit periodischen Randbedingungen ansehen.

Wenn wir $L \rightarrow \infty$ gehen lassen können wir Kontinuumszustände beschreiben



entspricht
einem
Ring

$$\phi(x=L) = \phi(0)$$

$$\phi'(x=L) = \phi'(0)$$

Stationäre SGL

$$(139) \quad \phi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = -k^2 \phi(x)$$

$$(140) \quad \phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Periodische Randbedingungen

$$kL \stackrel{!}{=} 2\pi n$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

(141)

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}$$

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

Quantisierung
des Impulses
 $p_n = \hbar k_n$

gemeinsame EZ von $\hat{H}$ und $\hat{p}$:

$$(142) \quad \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}}$$

Orthogonalisierung

$$(143) \quad \int_0^L dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) = \frac{1}{L} \underbrace{\int_0^L dx e^{\frac{2\pi i (n-m)x}{L}}}_{= \delta_{nm} L}$$

Vollständigkeit

$$(144) \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_n(y) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i n (x-y)}{L}} = \delta(x-y) \quad \text{im Intervall } (0, L]$$

Bew.: Fourierreihen

• Grenzübergang $L \rightarrow \infty$

Impulswerte werden kontinuierlich

$$(145) \quad \begin{aligned} k_n = \frac{2\pi}{L} n &\longrightarrow k \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} &\longrightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk \end{aligned}$$

kontinuierliche Wellenfunktionen: Faktor $\frac{1}{L}$ eliminieren

$$(146) \quad \phi_n(x) \longrightarrow \phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Dann ändert sich die Orthonomierung zu

$$(147) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-i(k-k')x} \\ = \delta(k-k')$$

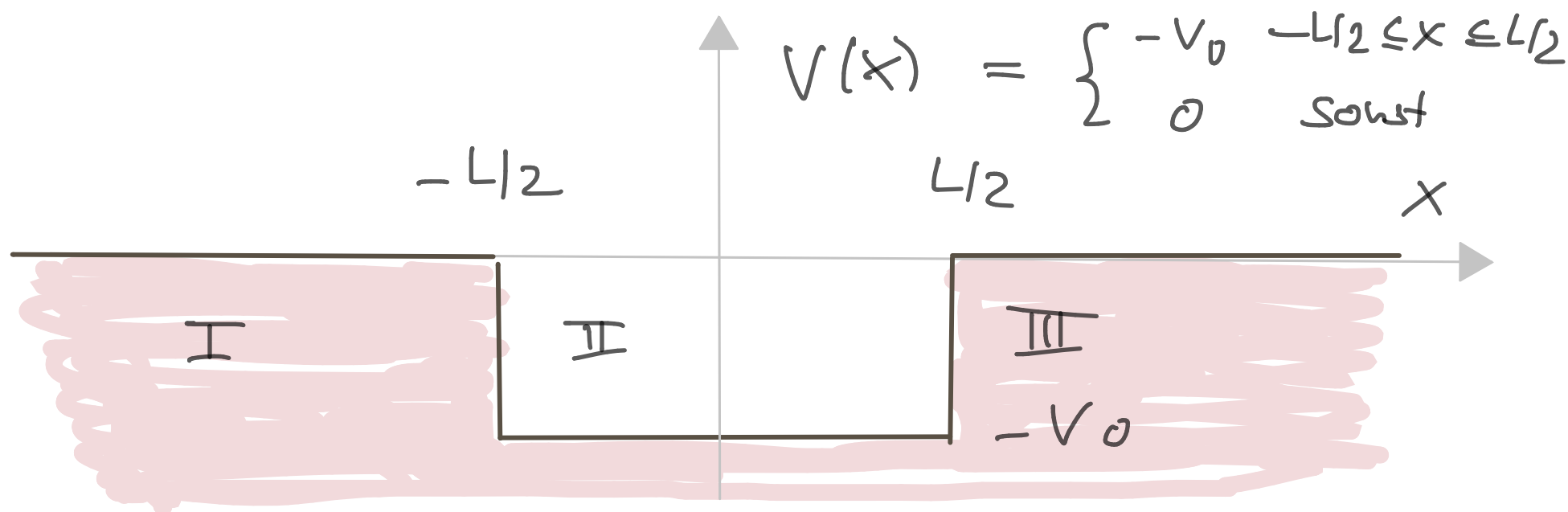
d.h. $\frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta(k-k')$

und die Vollständigkeitsrelation zu

$$\frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \underbrace{\sqrt{\frac{1}{L}} \phi_k^*(x)}_{\phi_n^*(x)} \underbrace{\sqrt{\frac{1}{L}} \phi_k(y)}_{\phi_n(y)} = \delta(x-y)$$

$$(148) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \phi_k^*(x) \phi_k(y) = \delta(x-y)$$

2.5 Gebundene und Streuzustände in einem endlichen Kastenpotential



Eigenzustände von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ in $\mathbb{R}$

A $\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ ist EZ von $\hat{p}$, denn

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \phi_k(x) = \hbar k \phi_k(x)$$

aber $|\phi_k(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_k(x)|^2 = \infty$

► keine gewöhnliche Normierung
⇒ keine Wahrscheinlichkeitsinterpretation

► nicht Element von $\mathcal{H}$

aber Grenzwert einer Sequenz
von Hilbertraumzuständen in $(0, L]$
für $L \rightarrow \infty$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}}$$

► Impulsraumdarstellung?

$$\tilde{\phi}_k(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iqx} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} = \delta(k-q)$$

$|\tilde{\phi}_n(q)|^2$ existiert nicht

B

analog

$$\tilde{\phi}_x(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}$$

ist Impulsraumwellenfunktl. der Eigenzustände von X

$$i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\phi}_x(k) = x \tilde{\phi}_x(k)$$

Orbitalraumwellenfunktion

$$\phi_x(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{iky} \tilde{\phi}_x(k)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(y-x)}$$

$$= \delta(x-y)$$

auch hier:

$|\phi_x(y)|^2$ existiert nicht

zu lösen: stationäre SG

$$(74g) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_E''(x) + V(x) \phi_E(x) = E \phi_E(x)$$

in Bereichen I, II, III getrennt + Übergangsbedingungen

$\phi_E(x)$, $\phi_E'(x)$ stetig

I, III

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_{I,III}''(x) = E \phi_{I,III}(x), \quad |x| \geq \frac{L}{2}$$

II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_{II}''(x) = (E + V_0) \phi_{II}(x), \quad |x| \leq \frac{L}{2}$$

Übergangsbedingungen

$$(150) \quad \begin{aligned} \phi_I(-\frac{L}{2}) &= \phi_{II}(-\frac{L}{2}) & \phi_{II}(\frac{L}{2}) &= \phi_{III}(\frac{L}{2}) \\ \phi_I'(-\frac{L}{2}) &= \phi_{II}'(-\frac{L}{2}) & \phi_{II}'(\frac{L}{2}) &= \phi_{III}'(\frac{L}{2}) \end{aligned}$$

(A) gebundene Zustände

$$-V_0 < E < 0$$

I, III

$$\phi''(x) = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \phi(x) \equiv \kappa^2 \phi(x)$$

$$\Rightarrow \phi(x) = A_+ \exp(\kappa x) + A_- \exp(-\kappa x)$$

Damit die Lösungen normierbar sind müssen sie für $|x| \rightarrow \infty$ abfallen, d.h.

$$\phi_I(x) = A_+ e^{+\alpha x} \quad -\infty < x \leq -\frac{L}{2}$$

$$\phi_{III}(x) = A_- e^{-\alpha x} \quad \frac{L}{2} \leq x < \infty$$

II

$$\phi''(x) = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \phi(x) = -k^2 \phi(x)$$

d.h.

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = C_+ e^{+ikx} + C_- e^{-ikx}$$

← 10.05.

Das obige Problem hat eine Inversiversione-trie

$$(157) \quad V(x) = V(-x)$$

Damit sind Eigenfunktionen von H auch Eigenfunktionen von $\hat{\Pi}$ (Gl. (132))

symmetrisch

$$\phi_E(x) = \phi_E(-x) \quad (152)$$

anti-symmetrisch

$$\phi_E(x) = -\phi_E(-x)$$

in beiden Fällen gilt

$$|\phi_E(x)|^2 = |\phi_E(-x)|^2$$

Symmetrisch

$$A_+ = A_-$$

$$C_+ = C_-$$

antisymmetrisch

$$A_+ = -A_-$$

$$C_+ = -C_-$$

Eine Auswertung der Übergangsbedingungen bei $x = (\pm)\frac{L}{2}$ liefert (wog. Symmetrie nur $+\frac{L}{2}$ oder $-\frac{L}{2}$)

symm.

$$\mathcal{R} = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \quad (153)$$

anti-symm

$$\mathcal{R} = -k \cot\left(k \frac{L}{2}\right) \quad (154)$$

Dies sind transzendente Gleichungen für E

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

die wir graphisch "lösen" wollen

$$\eta \equiv \mathcal{R} \frac{L}{2} \quad \xi \equiv k \frac{L}{2}$$

$\Rightarrow$

$$\eta = \xi \tan \xi$$

Symm.

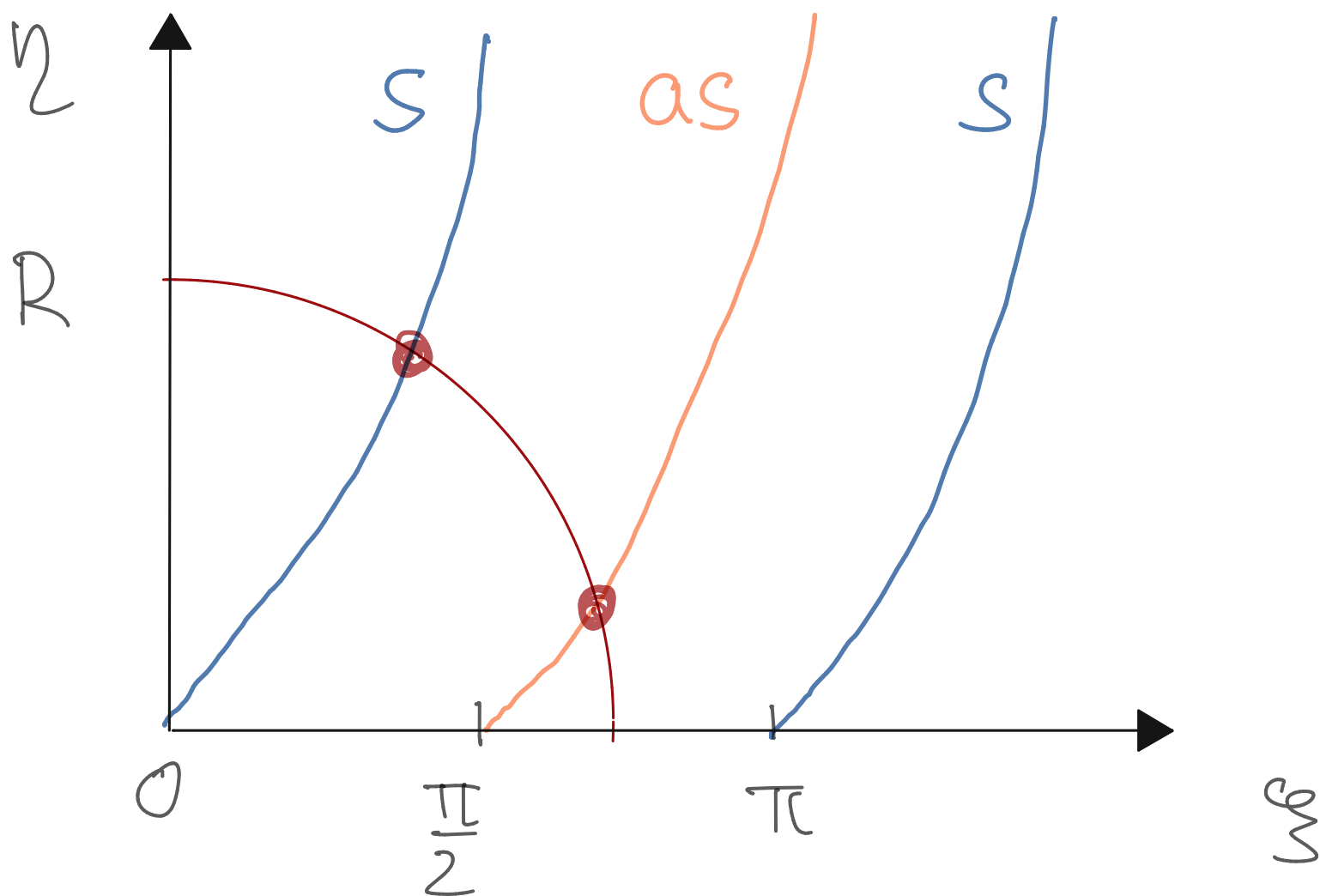
$$\eta = -\xi \cot \xi$$

anti-symm.

Es gilt

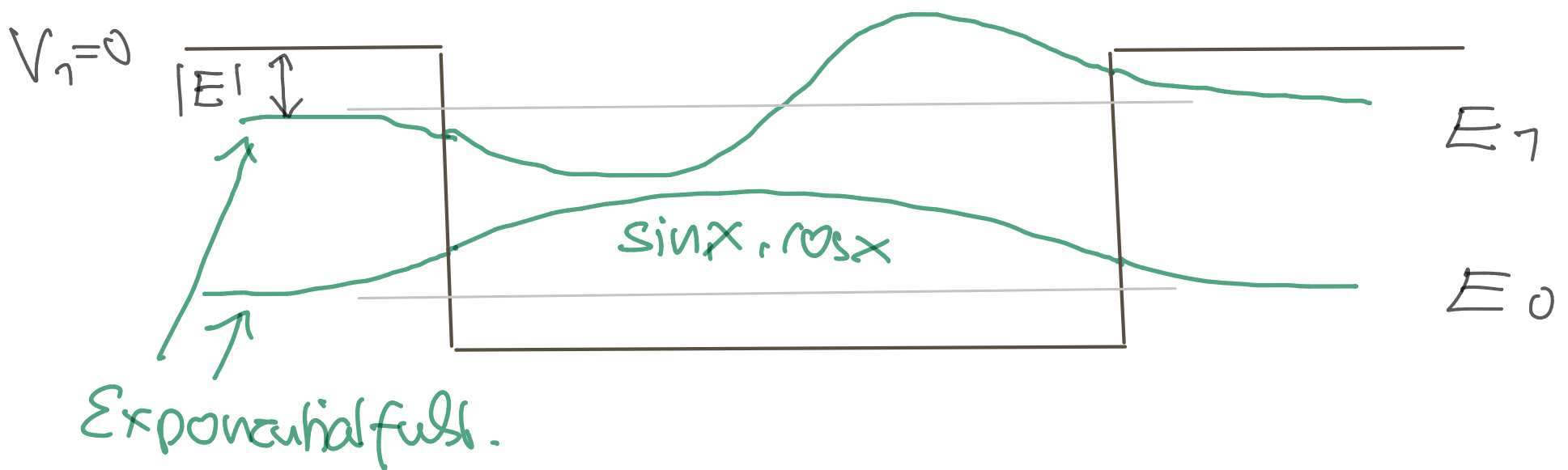
$$\eta^2 + \xi^2 = \frac{L^2}{4} (\mathcal{R}^2 + k^2) = \frac{L^2}{4} \left(\frac{2m|E|}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right)$$

$$(154) \quad = \frac{L^2 m}{2\hbar^2} V_0 \equiv R^2 \quad \text{konstante.}'$$



Wir sehen:

- $\exists$ mindestens ein gebundener Zustand
- $\exists$ nur endlich viele gebundene Zustände



- Im klassisch verbotenen Bereich klingt die Wellenfunktion exponentiell ab, da $|\psi|^2 \neq 0$

$$(155) \quad \phi \sim e^{-\kappa|x|} = e^{-|x|/d}$$

Eindringtiefe

besser $(|E| - V_1)$

$$(156) \quad d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}} \xrightarrow[\substack{\text{für} \\ |E| \rightarrow 0}]{\phantom{d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}}} \infty$$

Quantenmechanisch können sich Teilchen im klassisch verbotenen Bereich aufhalten!

(B) Streuzustände

$E > 0$

Für $E > 0$ ist die gesamte x -Achse klassisch erlaubt

I, III

$$\phi'' = -k_0^2 \phi$$

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

II

$$\phi'' = -k^2 \phi$$

$$k^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} > k_0^2$$

Lösungen sind Wellen

$$(157) \quad \phi_I(x) = \alpha_+ e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x}$$

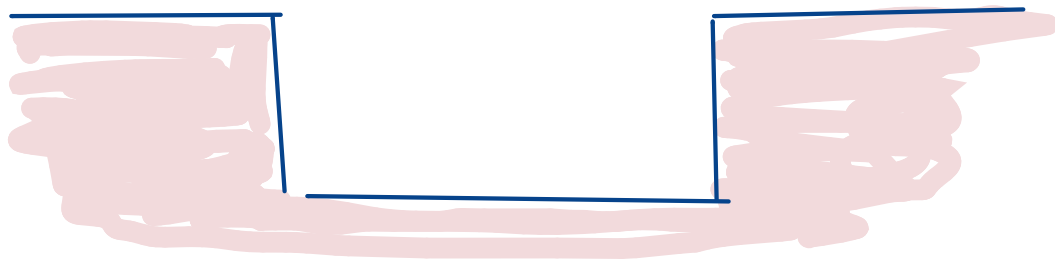
$$(158) \quad \phi_{III}(x) = \beta_+ e^{ik_0 x} + \beta_- e^{-ik_0 x}$$

$$(159) \quad \phi_{II}(x) = \gamma_+ e^{ikx} + \gamma_- e^{-ikx}$$

OBA $\beta_- = 0$ speziell $\alpha_+ = 1$ (statt $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$)

$$e^{ik_0 x} \quad \longrightarrow \quad \beta_+ e^{ik_0 x}$$

$$\alpha_- e^{-ik_0 x} \quad \longleftarrow$$



(160)

$$e^{ik_0 x - iEt/\hbar}$$

einlaufende ebene Welle

$$\alpha_- e^{-ik_0 x - iEt/\hbar}$$

reflektierte ebene Welle

$$\beta_+ e^{ik_0 x - iEt/\hbar}$$

transmittierte ebene Welle

• physikalische Bedeutung von α_- und β_+ ?

Stromdichten

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\phi^* \phi' - \phi \phi'^*)$$

einlaufende Welle

$$e^{ik_0 x}$$

$$\underline{j_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (167)}$$

reflektierte Welle

$$\alpha_- e^{-ik_0 x}$$

(162)

$$\underline{j_{\text{refl.}} = -\frac{\hbar k_0}{m} |\alpha_-|^2}$$

transmittierte Welle $\beta_+ e^{ik_0 x}$ (163) $\dot{j}_{\text{trans}} = \frac{\hbar k_0}{m} |\beta_+|^2$

Transmissionskoeffizient

(164)
$$T = \frac{|\dot{j}_{\text{trans}}|}{|\dot{j}_{\text{ein}}|} = |\beta_+|^2$$

Reflexionskoeffizient

(165)
$$R = \frac{|\dot{j}_{\text{refl}}|}{|\dot{j}_{\text{ein}}|} = |\alpha_-|^2$$

aus Kontinuitätsgleichung:

$$S(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |\phi(x)|^2 = \text{const}_t$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} = \dot{S} = 0 \Rightarrow j = \text{const}_x$$

I

(166)
$$\begin{aligned} \dot{j}_I &= \frac{\hbar}{2mi} (\phi_I^* \phi_I' - \phi_I'^* \phi_I) \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} (1 - |\alpha_-|^2) = \dot{j}_{\text{ein}} + \dot{j}_{\text{refl}} \end{aligned}$$

III

(167)
$$\dot{j}_{\text{III}} = \frac{\hbar k_0}{m} = \dot{j}_{\text{trans}}$$

d.h. $\dot{j}_{\text{ein}} + \dot{j}_{\text{refl}} = \dot{j}_{\text{trans}}$ oder

(168)

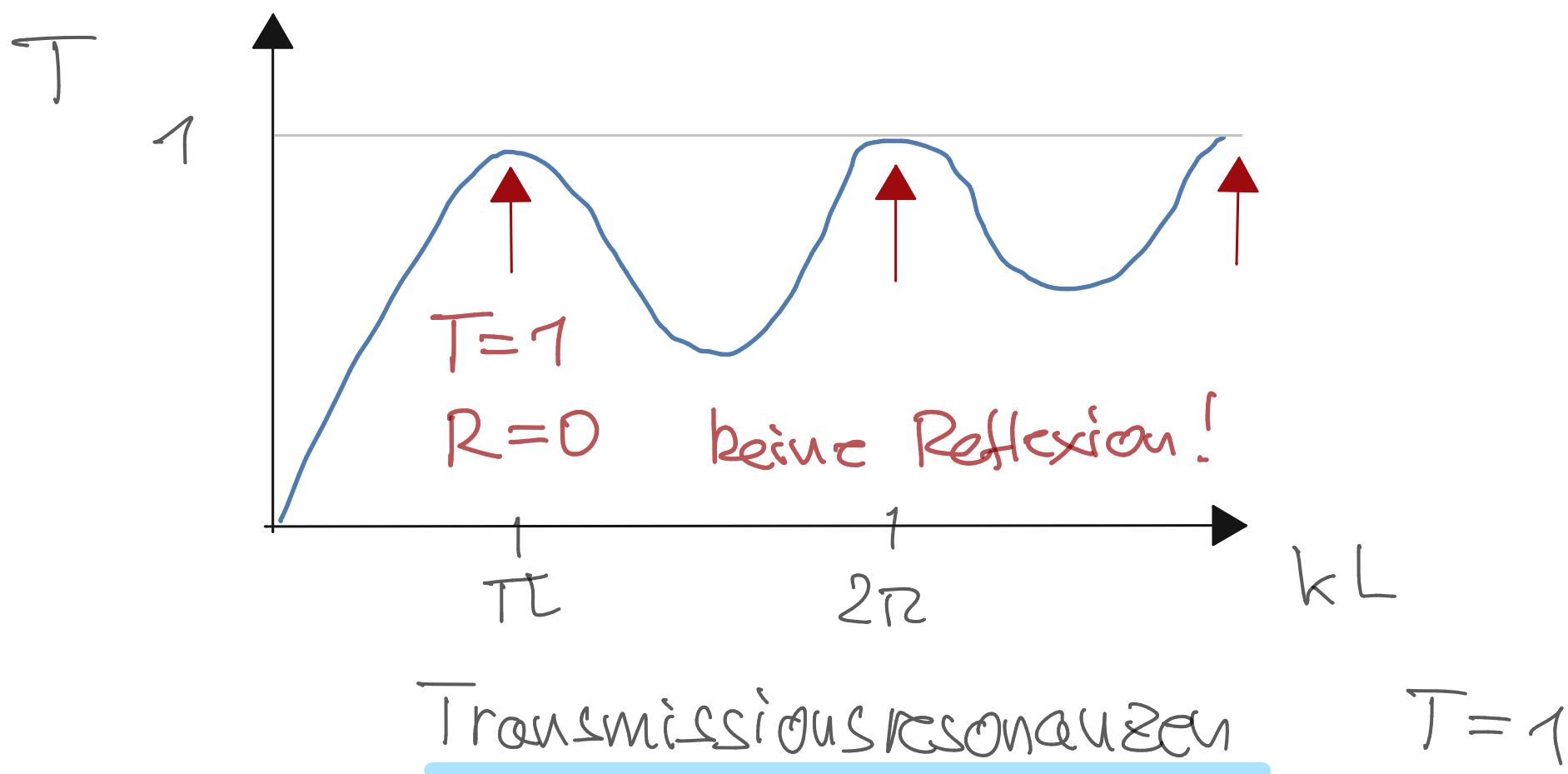
$$R + T = 1$$

Für das endliche Kastenpotential findet man
 $\Rightarrow \dots \Rightarrow$

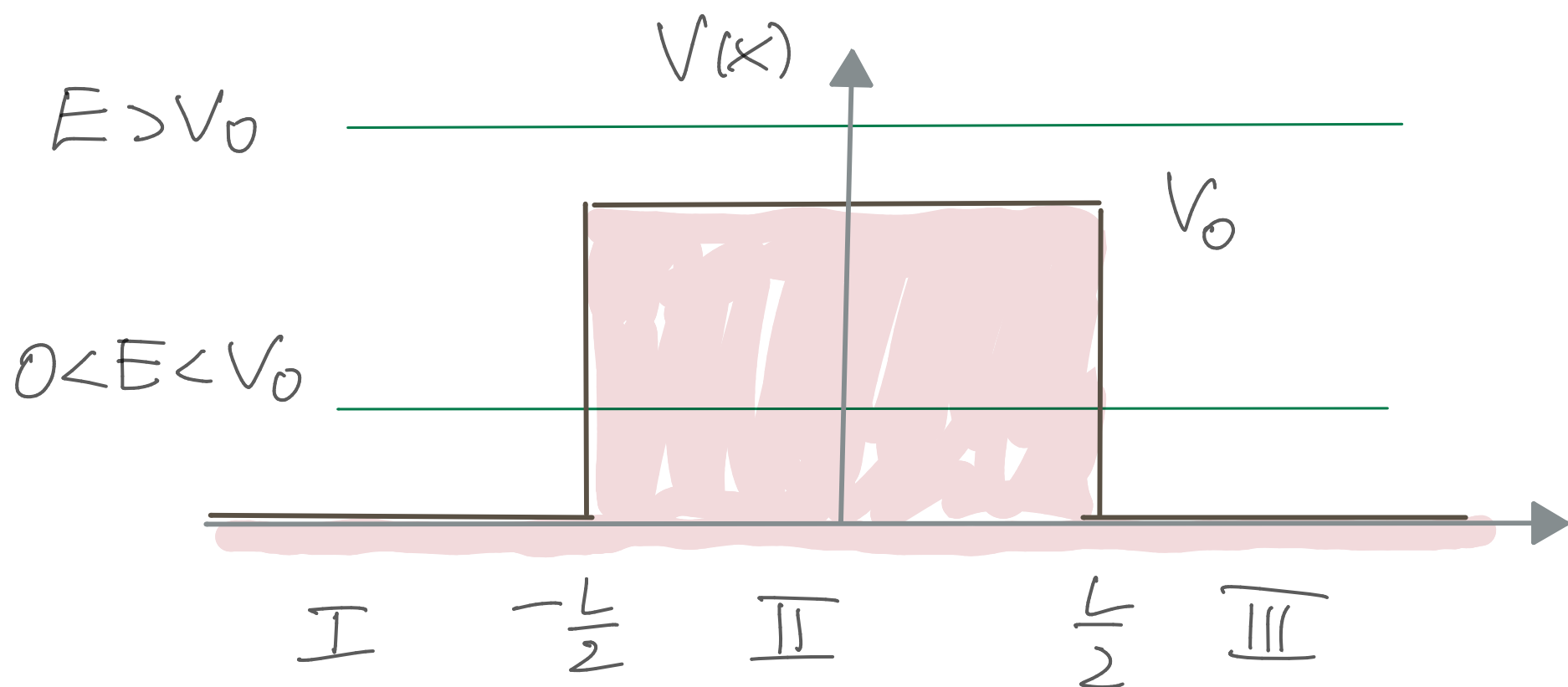
(169)

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2(kL)}$$

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



2.6 Endliche Kastenbarriere, Tunneleffekt



$E > V_0$

(170) $\phi_E(x) \sim \begin{cases} e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{ik_\gamma x} + \gamma_- e^{-ik_\gamma x} & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0 x} & x \geq \frac{L}{2} \end{cases}$

OBDL $\beta_- = 0$ und $\alpha_+ = 1$ (d.h. keine Normierung)

mit (171) $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ $k_\gamma^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \geq 0$

Das ist analog zu 2.5 mit $k \rightarrow k_\gamma$. Interessanter ist der Bereich

$0 < E < V_0$

klassisch gibt es keine
Transmission.

$$(172) \quad \phi_E(x) \sim \begin{cases} e^{ik_0 x} + d_- e^{-ik_0 x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{-\alpha x} + \gamma_- e^{\alpha x} & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0 x} & x \geq \frac{L}{2} \end{cases}$$

mit k_0 von oben und

$$(173) \quad \hbar^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\alpha^2} > 0$$

Man kann analog zu 2.5 vorgehen mit $k \rightarrow i\alpha$

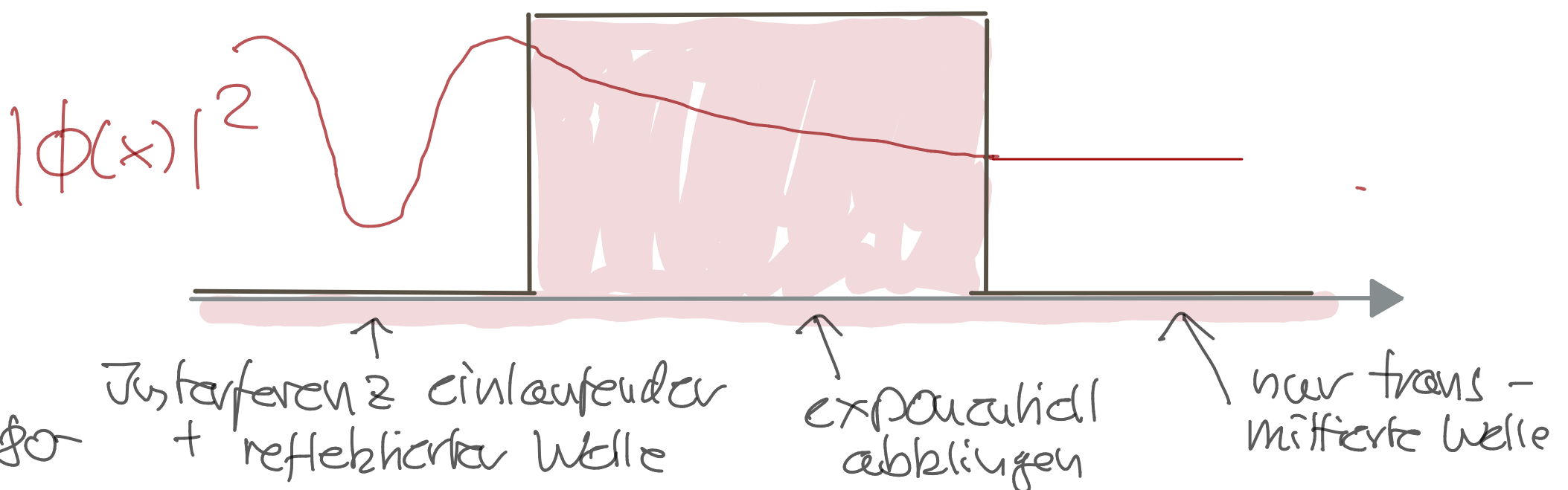
$\Rightarrow \dots \Rightarrow$

(174)

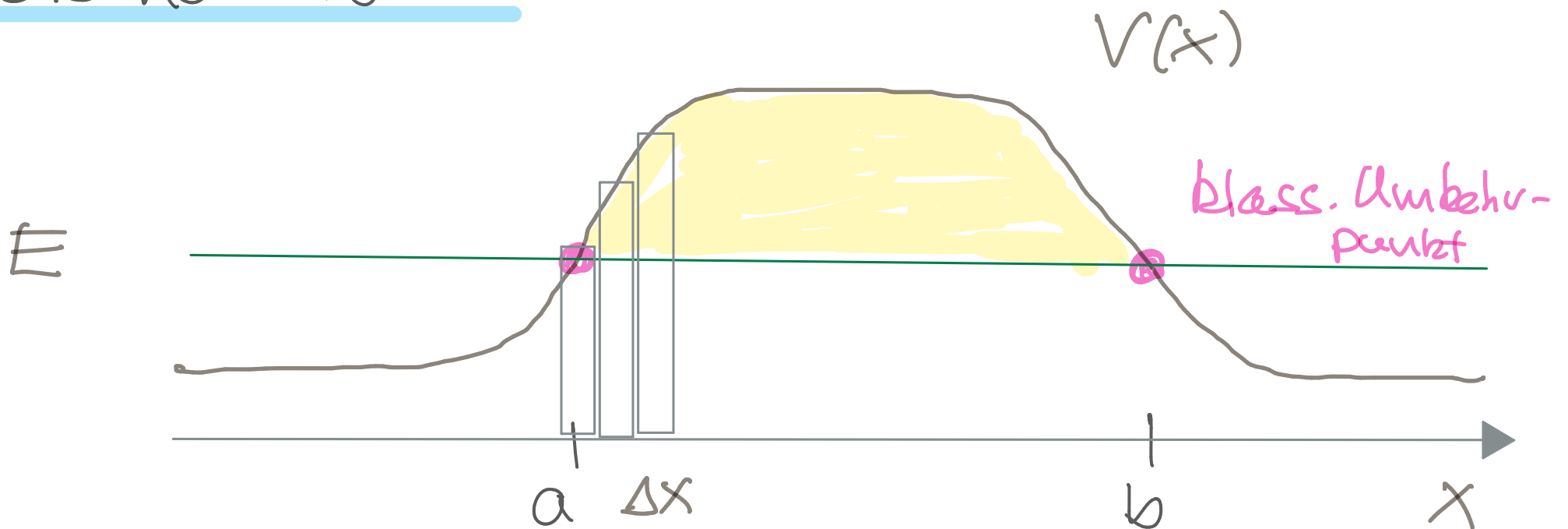
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \alpha L}$$

Es gibt eine Transmission im klassisch verbotenen Bereich

Tunnel effekt



Gamow Formel



Approximation von $V(x)$ als Abfolge kleiner Kastenbarrieren

einzelner Kasten Länge Δx und $\hbar E \Delta x \gg 1$

$$\sinh^2 \hbar \alpha \Delta x \approx \frac{1}{4} e^{2\alpha \Delta x}$$

$$T_j \approx \frac{16 E(V_j - E)}{V_j^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_j - E)} \Delta x\right)$$

$$T = \prod_j T_j \quad \text{Hintereinanderausfolge von Kästen}$$

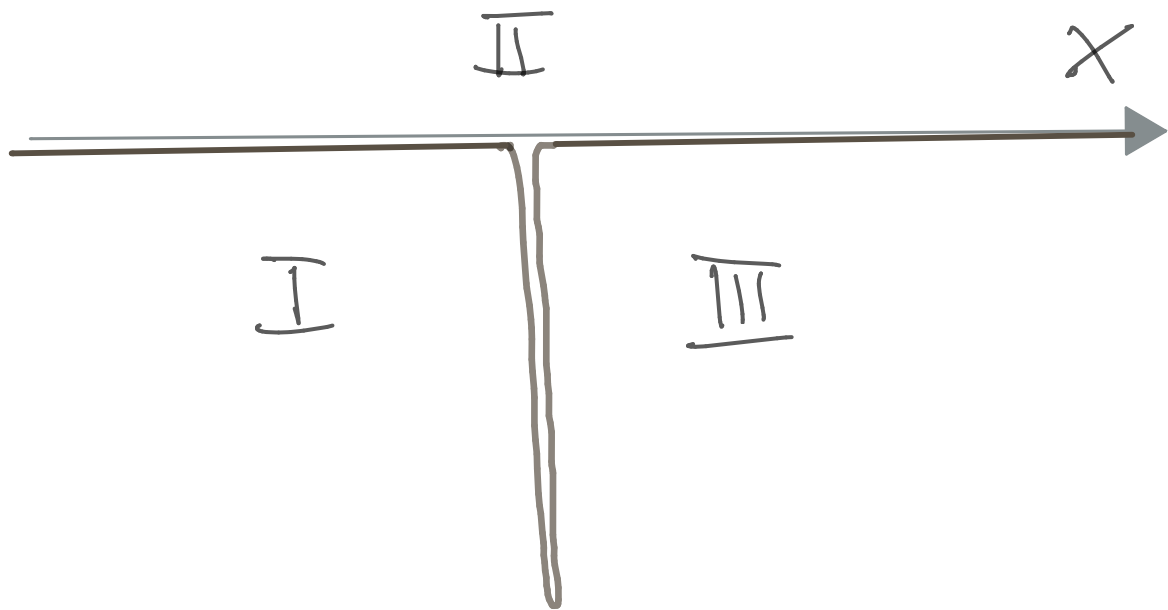
$$(175) \quad T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)}\right\}$$

Gamow Formel

Fläche zwischen $V(x)$ und E

2.7 Attraktives Deltapotential

$$V(x) = -A \delta(x)$$



(A) Betrachten wir dazu den endlichen Potentialtopf aus 2.5 jetzt aber im Grenzfalle

$$V_0 \rightarrow \infty \quad L \rightarrow 0$$

(176)

aber

$$V_0 L = A = \text{const}$$

$$\text{d.h.} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) = V_0 L = A \text{ const}$$

d.h.
(177)

$$V(x) \longrightarrow -A \delta(x)$$

Rechnung in 2.4 Gl. (154)

$$R^2 = y^2 + \frac{c_z^2}{2} = \frac{L^2}{2} \frac{m V_0}{\hbar^2} = \frac{L m A}{2 \hbar^2} \rightarrow 0$$

$\Rightarrow$

$\exists$ nur ein gebundener Zustand (symm.)

$$(178) \quad \mathcal{R} = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \xrightarrow{L \rightarrow 0} \frac{k^2 L}{2}$$

mit

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

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

d.h.

$$|E| = \frac{mL^2}{2\hbar^2} \left(\overset{\approx 0}{|E|^2} - 2\overset{\approx 0}{|E|V_0} + V_0^2 \right) \underset{(V_0 \rightarrow \infty)}{\approx} \frac{mL^2 V_0^2}{2\hbar^2}$$

$\Rightarrow$

$$(179) \quad E = -|E| = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}$$

Im gleichen Grenzfall bleiben nur die exponentiell abfallenden Teile in Gebieten I und III übrig

$$(180) \quad \phi_E(x) = W e^{-\frac{mA|x|}{\hbar^2}}$$

(B) direkte Rechnung

freies Teilchen für $x < 0$ (Region I)
und $x > 0$ (Region III)

Übergangsbedingung

$$(187) \quad \phi_{\text{I}}(0) = \phi_{\text{III}}(0)$$

Was ist mit $\phi'(x=0)$? Potential divergiert!
Integrieren wir die stationäre SQL in einer ε -Umgebung um $x=0$.

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_E(x) - A \delta(x) \phi_E(x) = E \phi_E(x) \right.$$

$$\left. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \phi_E(x) \right|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - A \phi_E(0) = 2\varepsilon E \phi_E(0)$$

$\hookrightarrow 0$
für $\varepsilon \rightarrow 0$

d.h.

$$(182) \quad \boxed{\phi_E'(+\varepsilon) - \phi_E'(-\varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2} A \phi_E(0)}$$

Ablätung macht einen Sprung!

Wenn man (187) und (182) auswertet ergibt sich dasselbe Resultat wie unter (A).

17.05. →