

Kapitel 2

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

2.1 Stationäre Zustände

Wir wollen die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

für ein vorgegebenes Potential lösen.

Weiter $V(x, t) \rightarrow V(x)$, d.h. V ist zeitunabhängig.

Ansatz: Trennung der Variablen

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

Das gibt nur einige Lösungen der Schrödinger-Gleichung, aber es wird gezeigt, dass mit Hilfe dieser Lösungen man die allgemeine Lösung konstruieren kann.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \psi \frac{d\phi}{dt} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{d^2 \psi}{dx^2} \phi \end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \psi \frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} \phi + V\psi\phi \quad \Big| \frac{1}{\psi\phi}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V$$

Linke Seite nur von t , rechte Seite nur von x abhängig \Rightarrow beide sind konstant.

Separationskonstante $E \Rightarrow i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = E$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\phi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \phi}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E, \quad \text{oder}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi} \quad \text{zeitunabhängige Schrödinger-Gl.}$$

Also, statt einer part. Diff. Gl. haben wir zwei gewöhnl. Diff. Gl.

Erste Gleichung $\Rightarrow \phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

(Eigentlich ist die allg. Lösung $\phi(t) = Ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, aber uns interessiert $\psi\phi$ und Konstante absorbieren wir in ψ).

Wir diskutieren jetzt die Lösungen der zeitunabh. Schrödinger-Gl.:

1.) Stationäre Zustände:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

ist zeitabhängig, aber die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^* e^{i\frac{Et}{\hbar}} \cdot \psi e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = |\psi(x)|^2$$

ist zeitunabhängig.

Für die Mittelwerte gilt:

$$\begin{aligned} \langle Q(x, p) \rangle &= \int \Psi^* Q(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi dx \\ &= \int \psi^* Q(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi dx \end{aligned}$$

Alle Erwartungswerte sind zeitunabhängig.

2.) Zustände mit bestimmter Energie:

Klassische Mechanik: Hamiltonian ("Gesamtenergie")(Hamilton-Funktion)

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

Quantenmechanik: Hamiltonoperator

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

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gl.:

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi} \quad (\text{Eigenwertgleichung})$$

Erwartungswert der Gesamtenergie:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E$$

(Normierung von $\Psi \Rightarrow$ Normierung von ψ)

Erwartungswert von H^2 :

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle &= \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx \\ \hat{H}^2 \psi &= \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2 \psi \\ \Rightarrow \langle H^2 \rangle &= E^2 \int \psi^* \psi dx = E^2 \end{aligned}$$

Unschärfe:

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

Alle Energiemessungen geben den Wert E .

3.) Die allgemeine Lösung der zeitunabh. Schröd. Gl. ist lineare Kombination von part. Lösungen.

Es gibt Lösungen $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots$ mit Separationskonstanten E_1, E_2, E_3, \dots

Wellenfunktion für jede erlaubte Energie:

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-iE_1 \frac{t}{\hbar}}, \quad \Psi_2(x, t) = \psi_2(x)e^{-iE_2 \frac{t}{\hbar}}, \dots$$

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung ist linear.

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n \frac{t}{\hbar}}$$

ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung.

Man muss nur c_n finden um die Anfangsbedingungen zu erfüllen.

Also: Es gibt $V = V(x)$ und $\Psi(x, 0)$.

Wir suchen $\Psi(x, t)$.

1.) Zeitunabhängige Gleichung $\Rightarrow \psi_1(x), \psi_2(x), \dots$ mit E_1, E_2, \dots

2.) $\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$

Wir zeigen später, dass es immer möglich ist.

$\Rightarrow c_1, c_2, \dots, c_n$

3.) $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n \frac{t}{\hbar}} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t)$

Alle einzelne Lösungen sind stationäre Zustände (alle Erwartungswerte sind zeitunabhängig), die allgemeine Lösung ist es nicht!

Beispiel:

$$\Psi(x, 0) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x)$$

(wir nehmen an, dass c_1, c_2, ψ_1, ψ_2 reell sind)

$\Psi(x, t)$ wird gesucht.

$$\Psi(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + c_2 \psi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= (c_1 \psi_1(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} + c_2 \psi_2(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t}) \cdot (c_1 \psi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + c_2 \psi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}) \\ &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 (e^{i \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t} + e^{-i \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t}) \\ &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + 2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos \left[\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right] \end{aligned}$$

\Rightarrow Wahrscheinlichkeitsdichte oszilliert mit der Zeit.

2.1.1 Einige wichtige Eigenschaften

1.) Separationskonstante E muss reell sein.

Beweis (Ü):

- in $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ wird E durch $E_0 + i\gamma$ ersetzt

- zeigen, dass $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ nur für $\gamma = 0$ erfüllt wird.

2.) $\Psi(x, t)$ ist immer komplex.

$\psi(x)$ kann man immer reell wählen:

-wenn $\psi(x)$ komplex ist, dann ist ψ^* auch eine Lösung

$\Rightarrow \psi + \psi^*$ (reell) ist auch eine Lösung

3.) Es soll $E > V_{min}$ erfüllt sein, sonst kann die Wellenfunktion nicht normiert werden:

-umschreiben wir $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$ als $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$

-wenn $E < V_{min}$, dann haben $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ und ψ gleiche Vorzeichen

\Rightarrow solche Funktion ist unbegrenzt

4.) Wenn $V(x)$ eine gerade Funktion ist (d.h. $V(x) = V(-x)$), dann kann

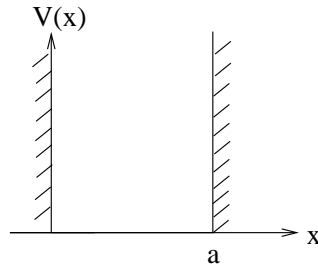
$\psi(x)$ immer gerade oder ungerade gewählt werden:

-wenn $\psi(x)$ die Schrödinger-Gl. erfüllt, dann erfüllt sie $\psi(-x)$ auch

$\Rightarrow \psi(x) \pm \psi(-x)$ ist auch eine Lösung, dabei entspricht "+"

der geraden und "-" der ungeraden Funktion.

2.2 Unendlich hoher Potentialtopf



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

In klassischer Mechanik: Bewegung hin und zurück.

Aussen: $\psi(x) = 0$

$$\text{Innen: } V = 0 \implies -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

$$\text{oder } \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \text{ mit } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

(wir wissen, dass $E > V_{min}$ sein soll $\implies E > 0$)

Die Gleichung ist die Gleichung des harmonischen Oszillators.

\implies die Lösung ist $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$, wobei A und B Konstanten

sind, die die Randbedingungen erfüllen und erlaubte k bestimmen.

Randbedingungen:

ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ sind normalerweise kontinuierlich, aber wenn V unendlich ist, ist nur ψ kontinuierlich. (Beweis später)

$$\psi(x) \text{ kontinuierlich} \implies \psi(0) = \psi(a) = 0$$

Erste Randbedingung:

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B \implies B = 0 \implies \psi(x) = A \sin kx$$

Zweite Randbedingung:

$$\begin{aligned} \psi(a) &= A \sin ka = 0 \\ A = 0 &: \text{triviale Lösung } \psi = 0 \end{aligned}$$

$$\implies \sin ka = 0 \implies ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots$$

$k = 0$: wieder triviale Lösung

Negative k geben uns nichts neues, weil $\sin -\theta = -\sin \theta$, also gibt es die gleiche Lösung für $A = -A$

\implies unterschiedliche Lösungen $k_n = n\frac{\pi}{a}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Randbedingungen bestimmen k (nicht A !) und deswegen auch E :

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

Das Teilchen kann nicht eine beliebige Energie haben, sondern nur die erlaubten Werte E_n !

Um die Konstante A zu finden, normieren wir $\psi(x)$:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2 kx dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1 \implies |A|^2 = \frac{2}{a}$$

$\implies A = \sqrt{2/a}$ (Vorzeichen hat keine Bedeutung!)

$\implies \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt vom Energiezustand ab und ist im Raum nicht konstant.

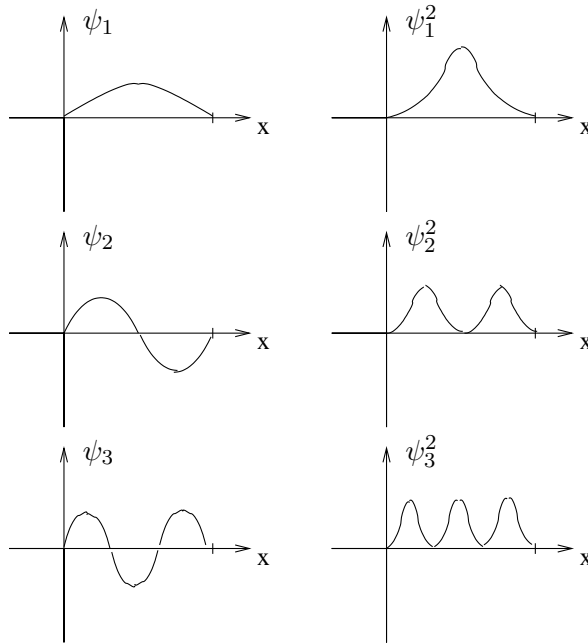
2.2.1 Eigenschaften von ψ_n

ψ_1 : Grundzustand, alle andere: angeregte Zustände

1. Funktionen sind abwechselnd gerade und ungerade bezüglich des Zentrums des Topfes. (Das stimmt für alle symmetrische Potentiale.)
2. ψ_n hat $n - 1$ Nullstellen. (Das stimmt allgemein.)
3. Orthogonalität von $\psi(x)$. Für $n \neq m$ gilt:

$$\frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 0$$

Für $n = m$: Normierungsbedingung.



Zusammengefasst:

$$\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

Kronecker-Symbol $\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$

$\psi_n(x)$ sind orthonormiert

Orthogonalität ist eine generelle Eigenschaft, die nicht nur für unendlich hohe Potentialtöpfe gilt. (Beweis später).

4. Vollständiges Funktionssystem. Jede Funktion $f(x)$ kann als lineare Kombination von ψ_n dargestellt werden:

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

(Fourier series, Dirichlet-Theorem)

Um c_m zu bestimmen, benutzen wir die Orthogonalität (Fourier-Trick):

$$\begin{aligned} \int \psi_m^*(x) f(x) dx &= \int \psi_m^* \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \\ &\Rightarrow c_n = \int \psi_n^*(x) f(x) dx \end{aligned}$$

Diese Eigenschaft stimmt für fast alle Potentiale (Beweis schwer); wird aber häufig als Postulat genommen.

Stationäre Zustände sind

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= \psi_n(x) e^{-iE_n \frac{t}{\hbar}} \\ &= \sqrt{2/a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i(n^2 \pi^2 \hbar / 2ma^2)t} \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung ist:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{2/a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i(n^2 \pi^2 \hbar / 2ma^2)t}$$

Wir sollen nur die Anfangsbedingungen erfüllen:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

Orthogonalität \Rightarrow

$$c_n = \sqrt{2/a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \Psi(x, 0) dx$$

Also, $\Psi(x, 0) \rightarrow c_n \rightarrow \Psi(x, t) \rightarrow$ alle Erwartungswerte.

Jetzt zeigen wir, dass $|c_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, bei einer Energiemessung den Wert E_n zu bekommen.

Dann soll $\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1}$ sein.

Überprüfen: c_n sind zeitunabhängig \Rightarrow wir rechnen für $t = 0$

$$\begin{aligned}
1 &= \int |\Psi(x,0)|^2 dx = \int \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) \right)^* \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \right) dx \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2
\end{aligned}$$

Berechnen wir den Erwartungswert der Energie, unter Benutzung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gl. $H\psi_n = E\psi_n$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \langle H \rangle &= \int \Psi^* H \Psi dx \\
&= \int \left(\sum c_m \psi_m e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} \right)^* \left(\sum c_n H \psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \right) dx \\
&= \int \left(\sum c_m \psi_m e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} \right)^* \left(\sum c_n E_n \psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \right) dx \\
&= \sum \sum c_m^* c_n E_n e^{i\frac{(E_m-E_n)}{\hbar}t} \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum |c_n|^2 E_n
\end{aligned}$$

$\langle H \rangle$ ist zeitunabhängig: Erscheinungsform der Energieerhaltung in der Quantenmechanik.

$$\langle H \rangle = \sum_n P_n E_n \quad \Rightarrow \quad P_n = |c_n|^2 \text{ ist die W'keit.}$$

2.3 Harmonischer Oszillator

Der quantenharmonische Oszillator ist ein wichtiges Modellsystem der Physik, da es eines der wenigen geschlossen (also ohne Näherungen und numerische Methoden) lösbarer Systeme der Quantenmechanik ist. Mit ihm können eine Reihe physikalischer Sachverhalte näherungsweise beschrieben werden:

1. In der Molekülphysik erlaubt er eine Näherung der Bindungsverhältnisse zwischen Atomen und ermöglicht so z. B. eine Vorhersage über Schwingungsspektren. Dies lässt sich verdeutlichen, indem eine Bindung durch zwei über eine Feder (harmonisches Potential) miteinander verbundene Massepunkte (die Atome), die gegeneinander schwingen, dargestellt wird.

2. In der modernen Atomphysik werden zu untersuchende Atome und Ionen in optischen Fallen (engl. magneto-optical trap, MOT) bzw. Ionenfallen gefangen und gekühlt, um z. B. bei Messungen eine höhere Auflösung zu erhalten. Außerdem kann man in solchen Fallen neue Zustände der Materie untersuchen (z. B. Bose-Einstein-Kondensate, Fermi-Kondensate). Solche Fallen weisen ein, in erster Näherung, parabolisches Potential auf. Somit können Teilchen in diesen Fallen ebenfalls mit dem Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beschrieben werden.
3. In der Festkörperphysik beschreibt das Einstein-Modell eine Methode, um den Beitrag der Gitterschwingungen (Phononen) zur Wärmekapazität eines kristallinen Festkörpers zu berechnen. Grundlage ist die Beschreibung des Festkörpers als aus N quantenharmonischen Oszillatoren bestehend, die jeweils in drei Richtungen unabhängig schwingen können. Außerdem können Phononen auch durch eine Ansammlung gekoppelter harmonischer Oszillatoren beschrieben werden. Dabei ist jedes Atom im Kristallgitter ein Oszillator, der an seine Nachbaratome gekoppelt ist.

Harmonischer Oszillator, klassisch:

$$F = -kx \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

Gute Näherung für jede kleine Schwingung.

Das QM Problem: wir lösen die Schr-Gl für das Potential

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

Die zeitunabh. Gl. lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$$

Wir benutzen die algebraische Methode. Mit Impulsoperator $p = (\hbar/i) \frac{d}{dx}$ schreiben wir die Schr. Gl. als

$$\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi$$

Wir führen jetzt die Leiteroperatoren (Kletteroperatoren, Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren) ein:

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x)$$

und berechnen das Produkt

$$\begin{aligned} a_- a_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)] \end{aligned}$$

Für Zahlen ist $xp = px$, für Operatoren aber nicht unbedingt!

Kommutator zweier Operatoren:

$$[A, B] = AB - BA$$

Mit dieser Notation

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p]$$

Wir berechnen $[x, p]$; dafür benutzen wir die Probefunktion $f(x)$:

$$[x, p]f(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(f) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(xf) = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{df}{dx} - x \frac{df}{dx} - f \right] = i\hbar f(x)$$

Also,

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

(kanonische Vertauschrelation)

Einsetzen in die obige Gl.:

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} \implies H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right)$$

Ähnlich bekommen wir

$$a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \implies H = \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right)$$

Das liefert

$$a_- a_+ = a_+ a_- + 1, \quad [a_-, a_+] = 1$$

Schr. Gl. lautet jetzt:

$$\hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi$$

Aussage: Wenn ψ die Schr. Gl mit der Energie E erfüllt, also $H\psi = E\psi$, dann $a_+\psi$ erfüllt die Schr. Gl mit der Energie $E + \hbar\omega$, also $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$.

Beweis:

$$\begin{aligned} H(a_+\psi) &= \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) (a_+\psi) = \hbar\omega \left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+ \right) \psi \\ &= \hbar\omega a_+ \left(a_-a_+ + \frac{1}{2} \right) \psi = a_+ \left[\hbar\omega \left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2} \right) \psi \right] \\ &= a_+(H + \hbar\omega)\psi = a_+(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi) \end{aligned}$$

q.e.d.

(Wir benutzen, dass $[a_-, a_+] = 1 \implies a_-a_+ = a_+a_- + 1$.)

Genauso, $a_-\psi$ ist eine Lösung mit der Energie $(E - \hbar\omega)$:

$$\begin{aligned} H(a_-\psi) &= \hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} \right) (a_-\psi) = \hbar\omega a_- \left(a_+a_- - \frac{1}{2} \right) \psi \\ &= a_- \left[\hbar\omega \left(a_-a_+ - 1 - \frac{1}{2} \right) \psi \right] = a_-(H - \hbar\omega)\psi = a_-(E - \hbar\omega)\psi \\ &= (E - \hbar\omega)(a_-\psi) \end{aligned}$$

Also, wenn eine Lösung bekannt ist, dann können wir auch alle andere finden.

a_+ heisst Erzeugungsoperator oder Aufsteigeoperator

a_- heisst Vernichtungsoperator oder Absteigeoperator.

Wenn wir den Absteigeoperator mehrmals anwenden, dann letztendlich bekommen wir $E = 0$, $\psi = 0$. Sei der niedrigste Zustand ψ_0 , dann

$$a_-\psi_0 = 0$$

oder explicit:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0$$

oder

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_0}{dx} &= -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0 \\ \int \frac{d\psi_0}{\psi_0} &= -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \implies \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{const} \\ \psi_0 &= A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

Normierung der Wellenfunktion:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx$$

Wir benutzen $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ und bekommen

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Um die Energie des Zustandes zu finden, setzen wir ψ_0 in der Schr. Gl.

$$\hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) \psi_0 = E_0\psi_0$$

Aus $a_-\psi_0 = 0$ folgt $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. (Grundzustand)

Andere Zustände:

$$\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x) \quad \text{mit} \quad E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

Drei Aussagen (ohne Beweis):

1. Normierungskonstante $A_n = 1/\sqrt{n!}$
2. Stationäre Zustände sind orthonormal $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{nm}$
3. Darstellung durch die hermiteschen Polynome (Charles Hermite):

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

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$

Hier das Bild 2.7

Bsp. Finden wir den ersten angeregten Zustand des Oszillators.

$$\psi_1(x) = A_1 a_+ \psi_0 = 1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} H_1\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Bsp. Erwartungswert der potentiellen Energie des n -ten Zustandes des Oszillators

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx$$

Allg.: um x^n oder p^n zu mitteln, stellen wir x und p durch a_{\pm} dar:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-) \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-)$$

Dann

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2 \right]$$

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* \left[(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2 \right] \psi_n dx$$

Aber: $(a_+)^2 \psi_n \sim \psi_{n+2}$ und ψ_{n+2}, ψ_n sind orthogonal \implies der Term verschwindet, genauso $(a_-)^2 \psi_n \sim \psi_{n-2}$. Wir bekommen:

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \left(\int \psi_n^* (a_+ a_-) \psi_n dx + \int \psi_n^* (a_- a_+) \psi_n dx \right)$$

Oben haben wir Schr.Gl. durch a_{\pm} dargestellt:

$$\hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi$$

und Energie ist $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Das gibt:

$$a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} = n + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad a_+ a_- = n \quad \implies \quad a_- a_+ = n + 1$$

Letzendlich

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} (n + n + 1) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = E_n/2$$

ist also eine Hälfte der vollen Energie, wie erwartet.

2.4 Freies Teilchen

Klassisch: Bewegung mit einer konstanten Geschwindigkeit

$V = 0$ überall \Rightarrow zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \text{oder} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

Die selbe Gleichung haben wir für das Teilchen im Topf (innen) benutzt.

Die Lösung diesmal in exponentialer Form

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Gibt es keine Randbedingungen \Rightarrow das Teilchen kann beliebige Energie $E > 0$ haben.

Mit üblicher Zeitfunktion $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)}$$

Eine Funktion von $(x \pm vt)$ entspricht einer ebenen Welle. Also, die Wellenfunktion eines freien Teilchens ist eine Überlagerung von 2 ebenen Wellen mit Phasengeschwindigkeit

$$v_{ph} = \frac{\hbar k}{2m} = v_{quant} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

Klassische Geschwindigkeit $v_{klass} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{quant} = 2v_{ph}$

Es scheint ein Widerspruch zu sein.

Zuerst diskutieren wir die Normierung.

Eine ebene Welle $Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$ ist nicht normierbar!

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = |A|^2(\infty)$$

\Rightarrow Ein freies Teilchen kann nicht im stationärem Zustand sein.

Oder: Es gibt keine Teilchen mit einer bestimmten Energie (= bestimmte k)

Das bedeutet aber nicht, dass diese Lösungen sinnlos sind. Die bilden die allgemeine Lösung.

Für die Zustände ψ_1, ψ_2, \dots mit E_1, E_2, \dots haben wir die Lösung in folgender Form geschrieben:

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

Hier ist E (oder k) kontinuierlich. \Rightarrow

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk$$

($k < 0$ bedeutet, dass die Welle nach links läuft)

\Rightarrow ist ein Wellenpaket

$\Psi(x, t) \rightarrow 0$ für $|x| \rightarrow \infty \Rightarrow$ die Funktion ist normierbar!

Anfangsbedingungen: $\Psi(x, 0)$ (normiert)

$$c(k) \rightarrow \frac{\alpha(k)}{\sqrt{2\pi}}$$

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

Fourier-Transformation und inverse Fourier-Transformation:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \Leftrightarrow f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

$F(k)$ ist Fourier-Transformierte von $f(x)$.

Fourier-Transformation \Rightarrow

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

Gruppengeschwindigkeit v_g des Paketes:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad \text{mit } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \\ v_{ph} &= v_q = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \\ \Rightarrow v_g &= 2v_{ph} = v_k \end{aligned}$$

Beispiel: Teilchen ist bei $t = 0$ lokalisiert:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & -a \leq x \leq a \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Wir suchen $\Psi(x, t)$.

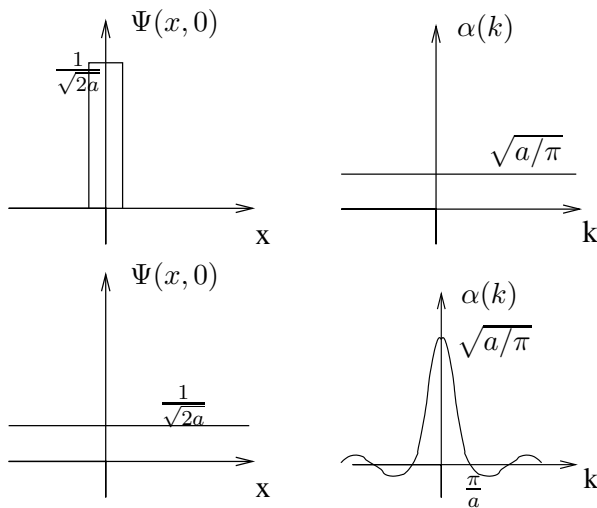
Zuerst normieren wir Ψ :

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^a dx = 2a|A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned} \alpha(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^a e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{-ik} \Big|_{-a}^a \\ &= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin ka}{k} \\ \Rightarrow \Psi(x, t) &= \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin ka}{k} \cdot e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk \end{aligned}$$

Zwei Grenzfälle:



1.) a ist klein $\Rightarrow \sin ka \approx ka \Rightarrow \alpha(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}}$

Unschärferelation:

x lokalisiert, $k \Rightarrow E \Rightarrow p = \hbar k$ beliebig. ($E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$)

2.) a groß, $\alpha(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin ka}{ka}$

$\frac{\sin z}{z}$ hat ein Maximum für $z = 0$.

Nullstellen (erste) bei $z = \pm\pi$ (d.h. $k = \pm\pi/a$)

Unschärferelation:

x nicht lokalisiert, $k \Rightarrow p$ lokalisiert.

2.5 δ -Funktion Potential

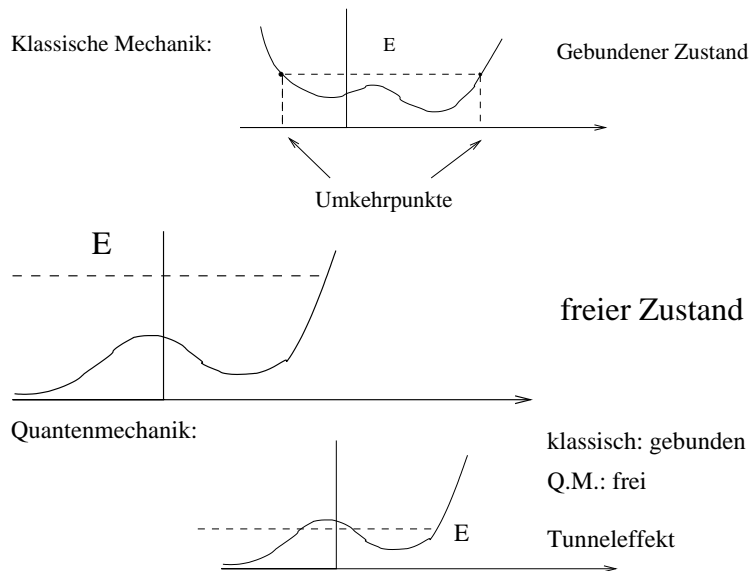
2.5.1 Gebundene und Streuzustände (freie Zustände)

2 Typen von Lösungen:

unendlich hoher Potentialtopf: normierbar, Energie diskret

freies Teilchen: nicht normierbar, Energie kontinuierlich

Physikalische Bedeutung?



$E < [V(-\infty) \text{ und } V(+\infty)] \Rightarrow$ gebundener Zustand

$E > [V(-\infty) \text{ oder } V(+\infty)] \Rightarrow$ Streuzustand

Normalerweise: $V(\pm\infty) \rightarrow 0 \implies$

1.) $E < 0$: gebundene Zustände

2.) $E > 0$: freie Zustände

2.5.2 δ -Funktion

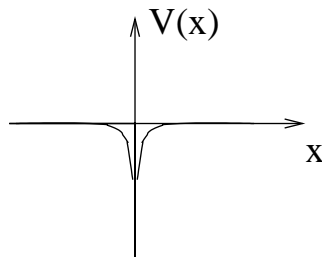
$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0 \\ \infty, & x = x_0 \end{cases}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1$$

$$\int_a^b \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} 1, & a < x_0 < b \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$$

Wir betrachten $V(x) = -\alpha\delta(x)$:

$$\alpha > 0$$



Schrödinger-Gleichung:

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

beschreibt gebundene ($E < 0$) und Streuzustände

1.) Gebundene Zustände

Bereich $x < 0$: $V(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (E < 0) \Rightarrow k \text{ reell}$$

Lösung: $\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$

Normierbar nur mit $A = 0 \Rightarrow$:

$$\psi(x) = B e^{kx} \quad (x < 0)$$

Bereich $x > 0$:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= F e^{-kx} + G e^{kx}, \quad \text{normierbar mit } G=0 \\ \Rightarrow \psi(x) &= F e^{-kx} \quad (x > 0) \end{aligned}$$

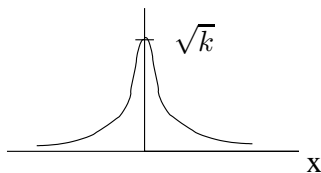
Wir sollen jetzt zwei Lösungen anpassen.

Randbedingungen:

- 1.) ψ kontinuierlich überall
 - 2.) $\frac{d\psi}{dx}$ kontinuierlich überall, ausser bei Punkten mit $V = \infty$
- 1.) $\Rightarrow F=B$

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} B e^{kx} & x \leq 0 \\ B e^{-kx} & x \geq 0 \end{cases} = B e^{-k|x|}$$

Normierung:



$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx &= 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \frac{|B|^2}{k} = 1 \\ \Rightarrow B &= \sqrt{k} \end{aligned}$$

Wie finden wir k ?

Dafür integrieren wir die Schr.Gl. von $-\varepsilon$ bis $+\varepsilon$, Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$

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

$$\downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \varepsilon \rightarrow 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon} \right) \qquad \qquad \qquad 0$$

$$\Rightarrow \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\psi(x) dx$$

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \Rightarrow$$

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\psi(x) dx = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} B \quad (*)$$

Für die gegebene Funktion:

$$\frac{d\psi}{dx} = -Bke^{-kx}, \quad x > 0$$

$$\frac{d\psi}{dx} = Bke^{kx}, \quad x < 0$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\varepsilon} = -Bk \qquad \Rightarrow \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = -2Bk \quad (**)$$

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon} = Bk$$

Aus * und ** folgt: $k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$

Also, es gibt nur einen gebundenen Zustand mit

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}, \quad E = -\frac{k^2\hbar^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

2.) Streuzustände $E > 0$:

Bereich $x < 0$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Bereich $x > 0$:

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

$$\psi \text{ ist kontinuierlich} \Rightarrow F + G = A + B \quad (***)$$

Ableitungen:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}), \quad x > 0 \\ \frac{d\psi}{dx} &= ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}), \quad x < 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_+ &= ik(F - G) \\ \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_- &= ik(A - B) \\ \Rightarrow \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) &= ik(F - G - A + B) \\ \psi(0) &= A + B \\ \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow ik(F - G - A + B) &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B), \quad \text{oder mit } \beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \\ F - G - A + B &= 2i\beta(A + B) \end{aligned}$$

Also, mit (***) gibt es 2 Gleichungen für A, B, F, G und k ist auch unbekannt.

Physikalische Bedeutung:

e^{ikx} mit der Zeitfunktion $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ gibt eine nach rechts laufende Welle

e^{-ikx} mit der Zeitfunktion $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ gibt eine nach links laufende Welle

Typisches Streuprobblem: Teilchen kommen nur von einer Seite, also $G = 0$.

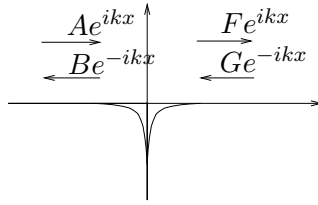
A : Amplitude der einfallenden Welle

B : Amplitude der reflektierten Welle

F : Amplitude der durchgehenden Welle

Dann haben wir:

$$F - A + B = 2i\beta(A + B) \quad \text{und} \quad F = A + B$$



$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta}A$$

Wahrscheinlichkeit der Reflektion:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{1}{1 + \beta^{-2}}$$

(Wenn es viele Teilchen gibt, dann gibt R die Anzahl von solchen an, die reflektiert werden)

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2}, \quad R + T = 1$$

(Transmission)

$$\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \beta^2 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}$$

Endlich:

$$R = \frac{1}{1 + \left(\frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}\right)}, \quad T = \frac{1}{1 + \left(\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}\right)}$$

Je grösser E ist, desto mehr Teilchen kommen durch.

Für Wellenpakete sind R und T nur annähernd bestimmt.

Nehmen wir $\alpha < 0 \Rightarrow$ Barriere

Dann gibt es keine gebundenen Zustände.

R und T sind nur von α^2 abhängig.

\Rightarrow bleiben unverändert \Rightarrow Tunnel-Effekt

Anwendungen:

1. Erste Anwendung in der Kernphysik war die Erklärung des radioaktiven Zerfalls. Gamow's Theorie: Lebensdauer $\tau \sim e^{1/\sqrt{E}}$.
2. Tunneliode. Zwei Halbleitern mit entgegengesetzt geladenen Ladungsträger, getrennt durch einen dünnen neutralen Bereich. Strom durch den Tunneleffekt, wird durch die angelegte Spannung gesteuert.
3. Rastertunnelelektronenmikroskop (scanning tunneling electron microscope) nutzt den Tunneleffekt im Vakuum aus.