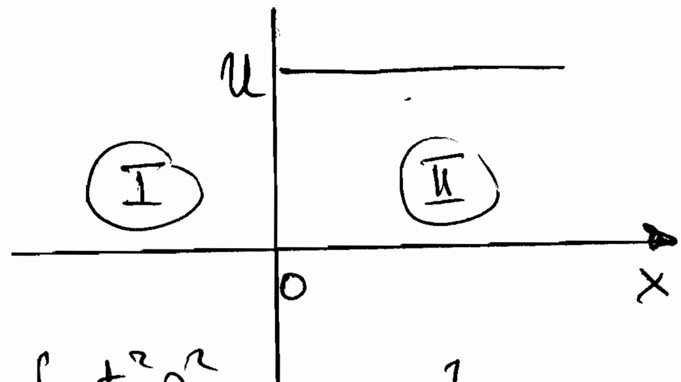
3. Eindimensionale Probleme

wir sehen gelegentlich zu Anwendungen, bevor wir in Grundsätzlichen fortfahren - auch im Hinblick auf die (wichtigen!) Übungen

3.1 Potentialstufe

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ U & x>0 \end{cases}$$



Schrödinger Gl. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x,t)$

- mit obigem $V(x)$ eine einfache DG - aber Vorsicht bei der Interpretation der Rechnung

Separation der t-Abhängigkeit

$$\psi = e^{-i/\hbar\, Et} \varphi(x) \qquad \text{in I und II !}$$

$$\rightarrow \quad E\varphi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{V(x)}_{=\text{const.}} \right\} \varphi(x)$$

„stationäre Lösung"

Lösungsansatz in I und II $\rightarrow$ const.

(ist lin. DG mit konst. Koeff., homogen)

$$\varphi = \text{const} \exp(i k_{I/II} x)$$

$$\rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2_{I/II}}{2m} + V_{I/II} = \frac{p^2_{I/II}}{2m} + V_{I/II}$$

so haben wir umgekehrt die Schrödinger Gl. geraten!

I $\quad \varphi_I = a_1 e^{i p_I x/\hbar} + a_2 e^{-i p_I x/\hbar}$

$\quad \varphi_{II} = a_3 e^{i p_{II} x/\hbar} + a_4 e^{-i p_{II} x/\hbar}$

mit $p_I = (2mE)^{1/2}$, $p_{II} = (2m(E-U))^{1/2}$ (18

haben vorwärts bzw. rückwärtslaufende ebene Wellen,

bzw. für $E < U$ imaginäres p_{II}, exponentielle

(i) ebene Wellen sind nicht normiert

(ii) bisher nur in Teilbereichen def. – brauchen Anschlussbedingungen

(i) bilden Wellenberge durch lineare Superposition:

1-dim.: Beziehung zwischen $\omega - k$ bzw. $E - p$ bis

a) Vorzeichen eindeutig

$$\psi_{I/II}(x,t) = \int\limits_{(E-\Delta E)/\hbar \leq \omega \leq (E+\Delta E)/\hbar} d\omega \, e^{i(\pm k_{I/II} x - \omega t)} \tilde{\varphi}_{I/II}(\omega)$$

$k = p/\hbar$
$\omega = E/\hbar$

$+kx$ für $a_{1,3}$ Teile
$-kx$ für $a_{2,4}$ "

(I) a_1-Wellenpaket nach rechts (pos x) ("einlaufend"
a_2 " " links ("rückwärtslaufend" ("reflektiert")

(II) a_3-Wellenpaket nach rechts ("auslaufend"
$a_4 = 0$ für typische Streuprobleme (bzw. gedämpfte Lösung

("kausal": Anfangswertproblem!)

(ii) Anschlußbedingungen: ψ und $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ bei Grenze $x=0$ (19

stetig, damit erst $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ Sprung hat - letzterer ist wegen des Sprungs in $V(x)$ erforderlich (falls Zweifel aufkommen: nehme eine abgerundete Stufe (arctan...) mit parameter a und bilde am Ende $a \to 0$ ($n \to \infty$...)

- Der Wahrscheinlichkeitsstrom $\frac{\hbar}{2m}\psi^* \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial x}} \psi$ und die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*\psi$ sind stetig.

rechnen nun mit ebenen Wellen weiter (Superposition zum Schluss)

$$a_1 \to 1, \quad a_2 \to a, \quad a_3 \to b, \quad a_4 \to 0$$

- ψ stetig bei $x=0$: $1 + a = b$ $\circledast$

- $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ stetig: $(1-a)\,p_I = b\,p_{II} \overset{\circledast}{=} (1+a)\,p_{II}$

$$\to \boxed{a = \frac{p_I - p_{II}}{p_I + p_{II}}, \quad b = \frac{2p_I}{p_I + p_{II}}}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\psi^* \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial x}} \psi = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Re}\,\psi^* \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$\underline{E > U}$ $$|\vec{j}_{II}| = \frac{b^2 p_{II}}{m}$$

$$j_I = \frac{p_I}{m}\,\mathrm{Re}\left(e^{-ip_I x/\hbar} + a^* e^{ip_I x/\hbar}\right)\left(e^{\frac{ip_I x}{\hbar}} - a e^{\frac{-ip_I x}{\hbar}}\right)$$

$$= \frac{p_I}{m}(1 - |a|^2) + \frac{p_I}{m}\underbrace{\mathrm{Re}\left(-a e^{-2i\frac{p_I x}{\hbar}} + a^* e^{2i\frac{p_I x}{\hbar}}\right)}_{=0}$$

$j_{einfallend} = p_I/m$

$j_{reflektiert} = -|a|^2 \, p_I/m$

$j_{trans} = |b|^2 \, p_{II}/m$

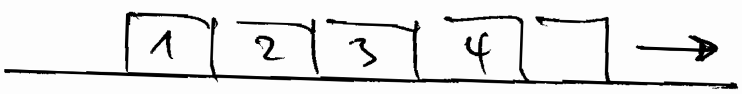
Reflektionskoeff $R = \dfrac{|j_{refl}|}{j_{einf}} = |a|^2$

Transmissionskoeff $T = \dfrac{j_{trans}}{j_{einf}} = |b|^2 \dfrac{p_{II}}{p_I}$

$$\boxed{R + T = |a|^2 + |b|^2 \frac{p_{II}}{p_I} \overset{!}{=} 1}$$ erfüllt (s. o.)

physikalisches Bild: Stromdichte = $\dfrac{\text{Zahl der Teilchen}}{\text{Länge} \cdot \text{Zeit}}$

statt einem Teilchen (Wellenpaket) + Ensembledurchschnitt:
kontinuierlicher Strom von Teilchen, deren Wellenfunktionen sich nicht überlappen (auf 1 normiert)



statt eines ψ-Wellenpakets die Vorstellung, daß die Teilchen über eine gewisse Distanz "verschmiert" sind (schon das Wort scheint wenig sauber Math.)

$E \gg U$: $p_I \sim p_{II} \rightsquigarrow a \sim 0, \; b \sim 1$

$R = 0, \; T = 1$ alles

$E \gtrsim U$: $p_{II} \sim 0 \rightsquigarrow a \approx 1, \; b \sim 2$ (fehlt dann)

$R \approx 1, \; T \sim 0$ fast alles refl.

$E < U$: $p_{II} = iP$ mit $P = +(2m(U-E))^{1/2}$

$$\psi_{II}(x,t) = b \, e^{\frac{1}{\hbar}(-Px - iEt)}$$ räumliche Dämpfung

$$a = \frac{p_I - iP}{p_I + iP}, \quad b = \frac{2p_I}{p_I + iP}$$

$$|a| = 1, \quad |\psi_{II}|^2 = |b|^2 e^{-2Px/\hbar}$$

$$T = 0, \quad R = 1$$

$\underline{U \to \infty}$: $P \to \infty, \quad a \to -1, \quad b \to 0$

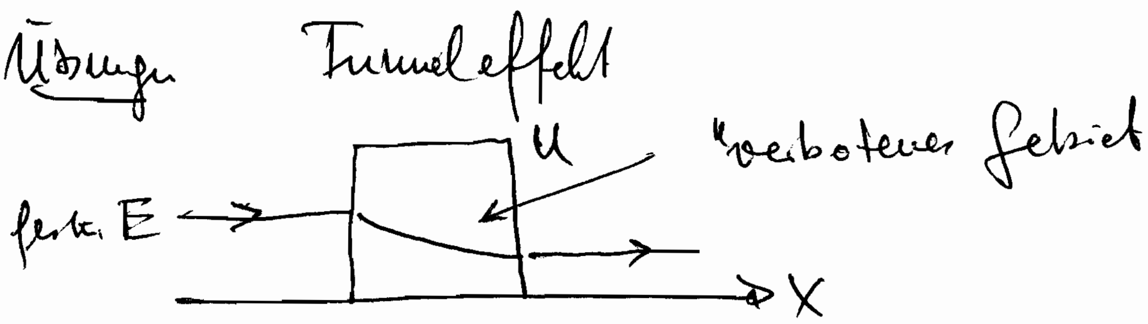
gibt stehende Welle $2i \sin\frac{p_I x}{\hbar} e^{-i/\hbar\, Et} = \psi_I$

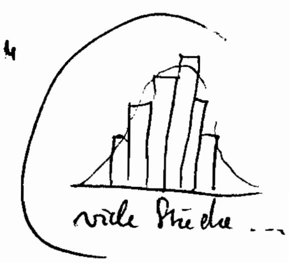
$0 = \psi_{II}$

$\psi_I(0,t) \equiv 0$ (! $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ bei $x=0$ unstetig) in diesem Grenzfall

---

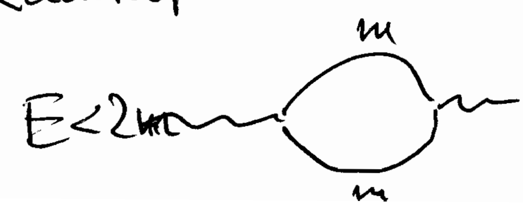
<u>Übungen</u> Tunneleffekt





der Energiesatz der klassischen Mechanik ist verletzt (siehe später E-t Unschärfe)

<u>Bem.</u> "virtuelle Erzeugung" von Teilchen in der Quantenfeldtheorie



3.2 Harmonischer Oszillator (das Arbeitspferd der Theor. Physik)

Beispiel für diskretes Spektrum – Lsg. der Schrödinger Gl.

Approx. für Minimum

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

$$i\hbar\dot{\psi} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\tilde{\omega}^2 x^2\right\}\psi(x,t) \quad \text{Schröd. Gl.}$$

stationäre Lösung (Sep.) $\psi(x,t) = e^{-i\omega t}\bar{\chi}(x)$ mit $\omega = E/\hbar$

gibt $E\bar{\chi}(x) = H\bar{\chi}(x)$

reskalieren $x = \alpha\xi$ mit $\alpha^2 = \hbar/m\tilde{\omega}$ →

$$\boxed{\underbrace{\frac{2E}{\hbar\tilde{\omega}}}_{=A}\chi(\xi) = \{\overbrace{-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2}^{\text{hermitescher Operator!}}\}\chi(\xi)}$$

1. Methode

(i) Ansatz für $\xi \to \infty$ (vernachlässige A)

$$\chi = e^{(\mp)\xi^2/2} H(\xi)$$

$$\to H'' - 2\xi H' + (A-1)H(\xi) = 0$$

(ii) $\xi \to 0$ Potenzreihenansatz + Koeff.-Vergleich

$$H(\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu :$$

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\{\underbrace{(\nu+2)(\nu+1)a_{\nu+2}}_{\text{nach Verschiebung } \nu\to\nu+2} + (-2\nu+A-1)a_\nu\}\xi^\nu = 0$$

→ Rekursionsformel!

für eine nicht abbrechende Reihe

$$a_{\nu+2} \sim \frac{2}{\nu}a_\nu \quad \text{für große } \nu$$

$$\to H(\xi) \sim \underbrace{e^{\xi^2}}_{\frac{1}{((\nu+2)/2)!}} = 1 + \underbrace{\xi^2}_{\frac{1}{(\nu/2)!}} + \xi^4/2! \quad \text{hohe Glieder!}$$

gerade bzw. ungerade Pot. wechseln.

dann $\chi(\xi) \sim e^{+\xi^2/2}$! nicht normierbar

→ Reihe muß <u>abbrechen</u>: $A = 2n+1$ $\quad (n=0,1,2)$

(ν nur jeweils gerade bzw. ungerade $\neq 0$)

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} \qquad \text{(a)}$$ HERMITEsche Polynome

$$\chi_n(\xi) = \text{Norm.}\; e^{-\xi^2/2}\, H_n(\xi)$$ " Funktionen

<u>n</u> ist auch Anzahl der Knoten!

die χ_n bilden vollständiges Orthonormalsystem, – bzw. die $H_n(\xi)$ mit Gewicht $e^{-\xi^2}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, H_m(\xi) = \delta_{n,m} \times \sqrt{\pi}\, 2^n n!$$

~~Norm.~~

(wie sin/cos bei Fourier $e^{\pm 2i\pi x}$)

<u>Hermitesche Polynome</u>: $$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \qquad \text{(b)}$$

(Wahl: reell!)

$n = 0$: $\quad 1$

$= 1$: $\quad 2\xi$

$= 2$: $\quad (2\xi)^2 - 2$ $\qquad$ → <u>Übung</u>

$= 3$: $\quad (2\xi)^3 - 12\xi$ $\quad$ etc.

- Erzeugende Funktion

$$f = e^{-(t^2 - 2t\xi)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\xi)$$ (betrachte Diff-Gl. $f'' - 2\xi f' + 2t \frac{\partial}{\partial t} f = 0$)

$f' = \frac{\partial}{\partial \xi} f$

- Rekursionsf.

$$H_n' = 2n H_{n-1}$$
$$2\xi H_n = H_{n+1} + 2n H_{n-1}$$

Normierung auf 1

$$\chi_n(\xi) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

→ Übung orthonorm. F.

---

2. Methode (algebraisch) ← fördern!

prominenter für harm. Oszillator

$$\frac{E}{\hbar\omega}\chi(\xi) = \mathcal{O}\chi(\xi)$$

Operator $\mathcal{O} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2 = \frac{1}{2}(-d_\xi + \xi)(d_\xi + \xi) + \frac{1}{2}$

$$\xi d_\xi - d_\xi \xi = [\xi, d_\xi] = -1$$ "Kommutator" (Vertauscher)

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(d_\xi + \xi) = a \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(-d_\xi + \xi) = a^+ \end{cases}$$

($a \sim$ " $ip + x$ " mit Reskalierung)

$$\mathcal{O} = a^+ a + \frac{1}{2}$$

" a^+ ": hermitesch konjugierter Operator ($a^+ \neq a$!)

$$(\chi, a\chi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^* \left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}\right)(d_\xi + \xi)\chi(\xi)\, d\xi$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}(-d_\xi + \xi)\chi^*\right)\chi(\xi)\, d\xi$$

$$=: (a^+\chi, \chi)$$

→ bald formaler (χ_1, χ_2) ist inneres Produkt im komplexen Vektorraum

$$\boxed{\underbrace{a^+a}_{} \chi_n = e_n \chi_n}$$

hermitesch

⇓

(reelle Eigenwerte!) siehe später allgemein

Eigenwert-problem

$$(\chi_1, a^+a\chi_2) = (a\chi_1, a\chi_2)$$
$$= (a^+a\chi_1, \chi_2)$$

$(\chi_n, \chi_n) = 1$ Normierung (25

$\rightarrow (\chi_n, a^+ a \chi_n) \overset{(i)}{=} (\chi_n, e_n \chi_n) = e_n (\chi_n, \chi_n) = \underline{e_n}$

$\overset{(ii)}{=} \underline{(a\chi_n, a\chi_n)} \geq 0$! reell, positiv

Angenommen, es existiert Eigenvektor χ_n (normiert)

dann $(a^+\chi_n, a^+\chi_n) = (\chi_n, a a^+ \chi_n) = (\chi_n, a^+ a \chi_n) + (\chi_n, \chi_n)$

da $\underline{[a, a^+] = 1}$

$= e_n + 1$

α) $(a^+a)(\underline{a^+\chi_n}) = a^+(a^+a + 1)\chi_n$ folgt Normierbarkeit von $a^+\chi_n$

$= a^+(e_n + 1)\chi_n = (e_n + 1)(\underline{a^+\chi_n})$

d.h. $a^+\chi_n$ ist Eigenvektor (E.V.) zum Eigenwert (E.W.) $e_n + 1$

$\rightarrow$ "Aufsteigeoperator a^+"

allgemein
$$a^+a\underbrace{(a^+)^k\chi_n} = (e_n + k)\underbrace{(a^+)^k\chi_n}_{\sim \chi_{n+k}\ !}$$

β) $(a^+a)(a\chi_n) = (aa^+ - 1)a\chi_n = a(a^+a)\chi_n - a\chi_n$

$= (e_n - 1)\underline{a\chi_n}$

allgemein
$$(a^+a)\, a^k \chi_n = (e_n - k)\underbrace{a^k\chi_n}_{\sim \chi_{n-k}}$$

$\rightarrow$ "Absteigeoperatoren a"

Normierbarkeit von $a\chi_n$: $\ell_n - k$ muß positiv sein! ≥ 0

(s.o. p 23)

Daher muß "Absteige"-Reihe abbrechen, ℓ_n muß natürliche Zahl oder Null sein:

$$a^+a\,\chi_0 = 0\,\chi_0 = 0_{\text{Vektor}}$$

$$(a\chi_0, a\chi_0) = (\chi_0, a^+a\,\chi_0) = (\chi_0, 0) = 0$$

$$\curvearrowright a\,\chi_0 = 0_{\text{Vekt.}}$$

bisher Existenz eines E.V. angenommen!

Existenz:

$$(a\chi_m, a\chi_m) = 0 \quad \text{mit} \quad (\chi_m, \chi_m) = 1$$

$$\curvearrowright a\chi_m = 0_{\text{Vekt.}} \quad (m = 0,\ \text{s.o.}):$$

$$(d_\xi + \xi)\,\chi_0(\xi) = 0 \quad \curvearrowright \chi_0(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}$$

$$\chi_n(\xi) = \underline{\text{Norm.}}\cdot(-d_\xi + \xi)^n\,\chi_0 \qquad n = 0, 1, \ldots$$

Normierung: zurück auf $\bar{\chi}(\underline{x})$ (erinnere $x/\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\tilde{\omega}}}$)

$$\bar{\chi}_0(x) = \left(\sqrt{\pi}\sqrt{\frac{\hbar}{\tilde{\omega} m}}\right)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$a^+\bar{\chi}_n = \sqrt{n+1}\,\bar{\chi}_{n+1}$$

$$a\,\bar{\chi}_n = \sqrt{n}\,\bar{\chi}_{n-1}$$

a^+a zählt die Anregungszahl n

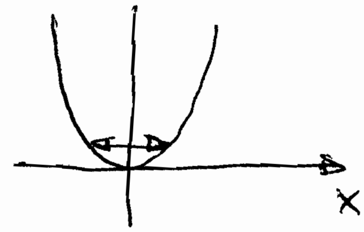
$$\boxed{E = \hbar\hat{\omega}\,(n + \tfrac{1}{2})}$$

diskretes Energiespektrum

(haben alle Eigenzustände gewonnen!)

Nullpunktsenergie $E = \frac{1}{2}\hbar\tilde{\omega}$

(nicht $= 0$! wie im klassischen Fall)



werden auf Oszillator gelegentlich zurückkommen (Unschärferelation, kohärente Zustände ...)

IV. Erwartungswert von Meßgrößen; Operatoren

Ehrenfestschen Sätze

⟶ (27

Lineare Diff. Gl. mit selbstadjungierten Operator geben ganz allgemein einen Satz von orthogonalen Eigenfunktionen ⇝ verallgemeinerte Fourier-Analyse; dies ist ein für die QM sehr wesentlicher Punkt und wird im Laufe der Vorlesung ausgebaut!

Übungen: „kohärente" Zustände

quasiklassische Bewegung des harmonischen Oszillators!

Wdhl.

Oszillatorpotential: allgem. Situation in Nähe von Minimum

1.) a) Schröd.-Gl. → Stationärer Ansatz → Diff.-Gl.

läßt sich hier wieder eine Superposition erreichen!

Reihe muß abbrechen

Behandlung, dann (Variable) Potenzreihenansatz

→ Rekursionsformel

2.) abstrakte Operatoren (Diff.-Op.) a^+, a

$$\left.\begin{matrix} a \\ a^+ \end{matrix}\right\} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\pm d_\xi + \xi\right)$$, sind hermitesch konjugiert

$$[a, a^+] = 1$$

Auf- und Absteigeoperatoren

Absteigereihe muß abbrechen, da $e_n \geq 0$

$$H = \underbrace{a^+ a}_{\mathcal{O}} + \tfrac{1}{2}$$

Norm...

$$\mathcal{O}\psi_n = e_n \psi_n$$

$$\underset{e_n}{\psi_n} \xrightarrow{a^+} \underset{e_{n+1}}{\psi_{n+1}} \xrightarrow{a^+} \dots$$

$$\xleftarrow{a} \overset{e_{n-1}}{\psi_{n-1}} \xleftarrow{a} \overset{e_n}{\psi_n}$$

diskretes Energiespektrum

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

Nullpunktsenergie

Haben bisher nicht detaillierte Frage nach Bewegung des Oszillators beantwortet, und nicht die Frage nach (nächstes Kapitel) Zusammenhang mit klassischer Bewegung) (kohärente Zustände → später)