English Summary:

1.4 Continuity equation

$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla \cdot \underline{j} = 0}$ with probability flux density $\underline{j} = \frac{1}{2m}\{\psi^* \hat{\underline{p}}_{kin}\psi + \psi(\hat{\underline{p}}_{kin}\psi)^*\}$

kinetic momentum op. $\hat{\underline{p}}_{kin} := \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}$ $\Leftrightarrow$ canonical momentum $\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$

$\Rightarrow \underline{j} = \mathrm{Re}\{\psi^* \hat{\underline{v}} \psi\}$ with velocity op. $\hat{\underline{v}} = \frac{\hat{p}_{kin}}{m}$

1.5 Time-independent Schrödinger eq.

$\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\hat{H}\varphi = E\varphi}$ energy eigenvalue E

stationary states

Allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergl.

Entwicklung nach stationären Zuständen $\varphi_n(\underline{r})$:

$$\psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\varphi_n(\underline{r})$$

Dies ist für verschiedene E_n kein stationärer Zustand:

$$\psi^*\psi = \sum_{n,m} c_n c_m^* e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}\varphi_n(\underline{r})\varphi_m^*(\underline{r}) \quad \text{zeitabhängig}$$

ψ kein Energie-Eigenzustand!

Bestimmung der c_n durch Anfangsbedingung:

$$\psi(\underline{r},0) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) \overset{!}{=} \psi_0(\underline{r})$$

Falls $\{\varphi_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem darstellt, kann jede stückweise stetige Fkt. nach den φ_n entwickelt werden:

Orthonormierung $\int \varphi_n(\underline{r})\varphi_m^*(\underline{r})\,d^3r = \delta_{nm}$

$$\Rightarrow \sum_n c_n \underbrace{\int \varphi_n(\underline{r})\varphi_m^*(\underline{r})\,d^3r}_{\delta_{nm}} = c_m \overset{!}{=} \int \psi_0(\underline{r})\varphi_m^*(\underline{r})\,d^3r$$

1.6 Stationäre Zustände in 1 Dimension

Eindimensionale zeitunabhängige Schrödingergl.:

$$\boxed{\hat{H}\varphi(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)}$$

Bem.: (i) Die Eigenwerte E des Ham.op. $\hat{H}$ stellen die Energie im jeweiligen Energie-Eigenzustand φ dar (= mögliche Messwerte).

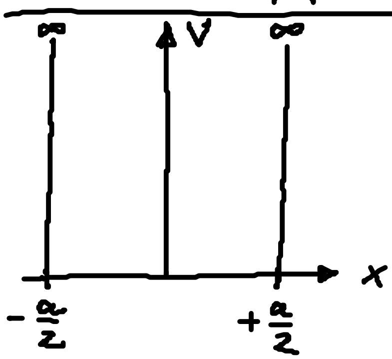
(ii) Ein diskretes Energiespektrum E_n wird durch Randbed. auf einem endlichen Intervall $[0, l]$ erzwungen

(Satz von Sturm-Liouville: Es existieren Eigenwerte $\{E_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ und ein vollständiges ONS von Eigenfkt.en $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$

$\hat{=}$ quantisierte Energie der gebunden Zustände

(iii) Ein kontinuierliches Energiespektrum ist nur möglich auf dem unendlichen Intervall $(-\infty, \infty)$ $\hat{=}$ Streuzustände

Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ \infty & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

Schrödingergl. für $|x| < \frac{a}{2}$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - E\right)\varphi(x) = 0 \qquad \text{(zeitunabh.)}$$

Randbed.: $\varphi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$

ebenso für $|x| > \frac{a}{2}$: $\varphi(x) = 0$

$\Big\}$ damit $V\varphi$ nicht unendlich wird

Das Teilchen ist also auf $(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ beschränkt.

<u>Ansatz</u>: $\varphi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Randbed.: $\varphi(\frac{a}{2}) = A\cos\frac{ka}{2} + B\sin\frac{ka}{2} = 0$

$\varphi(-\frac{a}{2}) = A\cos\frac{ka}{2} - B\sin\frac{ka}{2} = 0$

nichttriviale Lösungen, falls

$$\begin{vmatrix} \cos\frac{ka}{2} & \sin\frac{ka}{2} \\ \cos\frac{ka}{2} & -\sin\frac{ka}{2} \end{vmatrix} = -2\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{ka}{2} = -\sin(ka) \overset{!}{=} 0$$

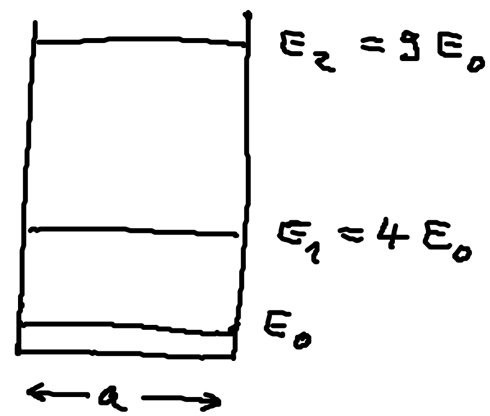
$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} ka &= (n+1)\pi \\ E_n &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n+1)^2 \end{aligned}} \quad n \in \mathbb{N}_0$$

<u>Erg.</u>: Die Wellenmechanik liefert stationäre Zustände nur für bestimmte <u>diskrete</u> Energien E_n, der <u>Grundzustand</u> ist $E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} > 0$

$\Downarrow$

Unschärferelation

$\Delta p \Delta x \geq \hbar k_0 a = \hbar\frac{\pi}{a}\cdot a = \hbar\pi = \frac{h}{2}$



Nach der klass. Teilchenmechanik wären alle Energien $E \geq 0$ erlaubt!

<u>Wellenfunktionen</u>

(a) $n = 0, 2, 4, \ldots$ bzw. $n = 2m$, $m = 0, 1, 2, \ldots$

$$\frac{ka}{2} = (2m+1)\frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad \cos\frac{ka}{2} = 0$$

$$\Rightarrow \varphi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = \pm B \sin\frac{ka}{2} = \pm B(-1)^m \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \underline{B=0}$$

$$\boxed{\varphi_{2m}(x) = A\cos\frac{(2m+1)\pi x}{a}} \qquad m = 0,1,2,\ldots$$

<u>gerade</u> Lösungen, d. h. $\varphi(-x) = \varphi(x)$

(b) $n = 1,3,5,\ldots$ bzw. $n = 2m+1$, $m = 0,1,2,\ldots$

$$ka = 2(m+1)\pi \quad \Rightarrow \quad \sin\frac{ka}{2} = 0$$

$$\Rightarrow \varphi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = A\cos\frac{ka}{2} = A(-1)^m \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \underline{A=0}$$

$$\boxed{\varphi_{2m+1}(x) = B\sin\frac{2(m+1)\pi x}{a}} \qquad m = 0,1,2,\ldots$$

<u>ungerade</u> Lösungen, d. h. $\varphi(-x) = -\varphi(x)$

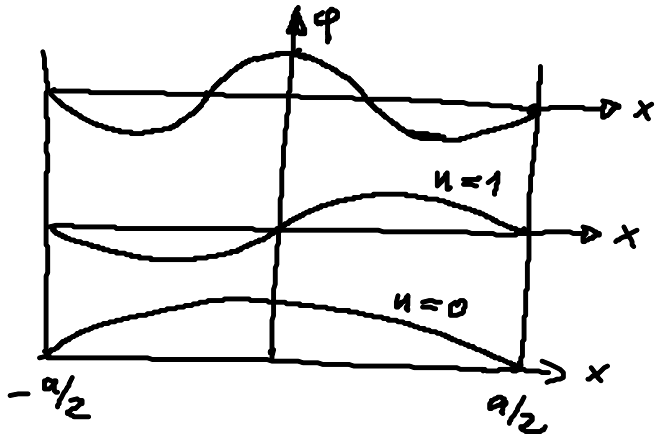
<u>Normierung</u> : $\int_{-a/2}^{a/2} dx\, |\varphi(x)|^2 = 1$

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx \begin{Bmatrix} A^2\cos^2\left(\overbrace{\frac{(2m+1)\pi x}{a}}^{\alpha}\right) \\ B^2\sin^2\left(\overbrace{\frac{2(m+1)\pi x}{a}}^{\alpha'}\right) \end{Bmatrix} = \frac{1}{2}\int_{-a/2}^{a/2} dx \begin{Bmatrix} A^2(1+\cos(2\alpha x)) \\ B^2(1-\cos(\underbrace{2\alpha x}_{\phi})) \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} \frac{1}{2}A^2 a + \frac{1}{2}A^2 \int_{-(2m+1)\pi}^{(2m+1)\pi} \frac{d\phi}{2\alpha}\cos\phi \\ \frac{1}{2}B^2 a - \underbrace{\frac{1}{2}B^2 \int \frac{d\phi}{2\alpha'}\cos\phi}_{0} \end{Bmatrix}$$

Integration über vielfache Perioden 2π

$$= \begin{Bmatrix} \frac{1}{2}A^2 a \\ \frac{1}{2}B^2 a \end{Bmatrix} \overset{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad \begin{matrix} A = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \\ B = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \end{matrix}$$



Mit aufsteigender Energie nimmt die Zahl der Nullstellen im $\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$ (= **Knoten**) jeweils um 1 zu (**Knotensatz** der QM $\hat{=}$ Satz von Sturm-Liouville)

Parität

Sei $V(x) = V(-x)$: symm. Potenzial

Schrödinger-Gl.: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x)$

$x \to -x$: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{V(-x)}_{V(x) \text{ für symm. Pot.}}\right]\varphi(-x) = E\varphi(-x)$

Also ist mit $\varphi(x)$ auch $\varphi(-x)$ eine Lösung der Schrödingergl.
Wegen der Linearität sind dann auch

$$\varphi_g(x) = \varphi(x) + \varphi(-x) \qquad (\text{falls } \varphi(x) \neq -\varphi(-x))$$

und

$$\varphi_u(x) = \varphi(x) - \varphi(-x) \qquad (\text{falls } \varphi(x) \neq \varphi(-x))$$

Lösungen. Diese sind bei Ortsspiegelung gerade bzw. ungerade

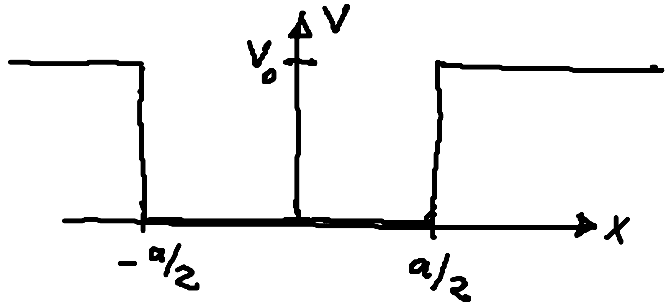
$$\varphi_g(-x) = \varphi(-x) + \varphi(x) = \varphi_g(x) \quad \text{gerade Parität}$$

$$\varphi_u(-x) = \varphi(-x) - \varphi(x) = -\varphi_u(x) \quad \text{ungerade Parität}$$

Also kann man bei symm. Pot. die Eigenfkt.en stets gerade oder ungerade wählen:
Die Parität ist eine Erhaltungsgröße

Symm. Potenzialtopf: Die Eigenfkt.en sind abwechselnd gerade und ungerade.

Potenzialtopf mit endlich hohen Wänden



$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ V_0 > 0 & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$|x| < \frac{a}{2}$: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - E\right)\varphi(x) = 0$

Ansatz: $\varphi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$|x| \geq \frac{a}{2}$ $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0 - E\right)\varphi(x) = 0$

Ansatz für $0 \leq E \leq V_0$ (Energiebereich, in dem es klassische gebundene Zustände gibt):

$x \geq \frac{a}{2}$: $\varphi(x) = Ce^{-\gamma x} + De^{\gamma x}$

$x \leq -\frac{a}{2}$: $\varphi(x) = C'e^{\gamma x} + D'e^{-\gamma x}$

Wegen Normierbarkeit der Wellenfkt.:

$D = 0$ (sonst divergiert φ für $x \to \infty$)

$D' = 0$ (" " φ für $x \to -\infty$)

einsetzen in Schrödingergl.:

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m}$$

Stetigkeitsbed.

Allgemein folgt aus $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + (V(x) - E)\varphi = 0$:

$$\varphi'(x+\varepsilon) - \varphi'(x-\varepsilon) = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} dx'\, \varphi''(x') = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} dx' \left[V(x') - E\right] \varphi(x') \xrightarrow{\varepsilon \to 0} 0$$

(wenn $V(x)$ und $\varphi(x)$ endlich)

Also sind für $|V(x)| < \infty$ $\varphi'(x)$ und damit $\varphi(x)$ stetig.

$\Rightarrow$ Ü endlicher Potenzialtopf:
stetig diff.baren Anschluss der Wellenfkt. bei $x = \pm \frac{a}{2}$.