

English Summary:

1.4 Continuity equation

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

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

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

1.5 Time-independent Schrödinger eq.

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

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:

$$\psi(\underline{r}, 0) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) = \varphi_0(\underline{r})$$

Falls $\{\varphi_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem

darstellt, kann jede stückweise stetige Fkt.

nach den φ_n entwickelt werden:

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

$$\Rightarrow \sum_n c_n \underbrace{\int \varphi_n(\underline{r}) \varphi_m^*(\underline{r}) d^3r}_{\delta_{nm}} = c_m \stackrel{!}{=} \int \varphi_0(\underline{r}) \varphi_m^*(\underline{r}) d^3r$$

1.6 Stationäre Zustände in 1 Dimension

Ein-dimensionale zeitunabhängige Schrödingergl.:

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

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

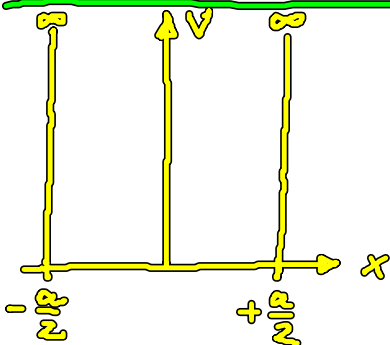
(ii) Ein diskretes Energiespektrum E_n wird durch Randbed. auf einem endlichen Intervall $[0, l]$ erzwungen

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

\triangleq quantisierte Energie der gebundenen Zustände

(iii) Ein kontinuierliches Energiespektrum ist nur möglich auf dem unendlichen Intervall $(-\infty, \infty)$ \triangleq Streuungszustände

Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden:



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

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

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

Randbed.: $\varphi(\pm \frac{a}{2}) = 0$ } damit $V\varphi$ nicht
ebenfalls für $|x| > \frac{a}{2}$: $\varphi(x) = 0$ } unendlich wird

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

Ansatz: $\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$

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

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

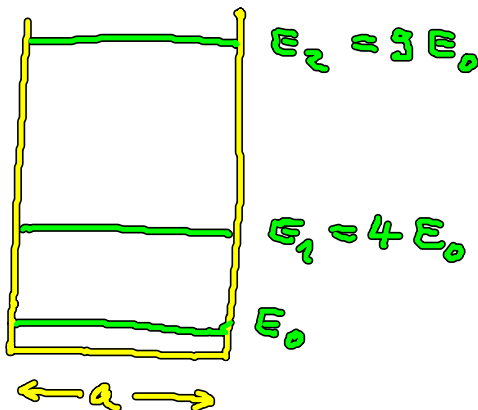
$\varphi(-\frac{a}{2}) = A \cos \frac{ka}{2} - B \sin \frac{ka}{2} = 0$

nichttriviale Lösungen, falls

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

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

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



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

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

Wellenfunktionen

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

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

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

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

gerade Lösungen, d. h. $\varphi(-x) = \varphi(x)$

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

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

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

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

ungerade Lösungen, d. h. $\varphi(-x) = -\varphi(x)$

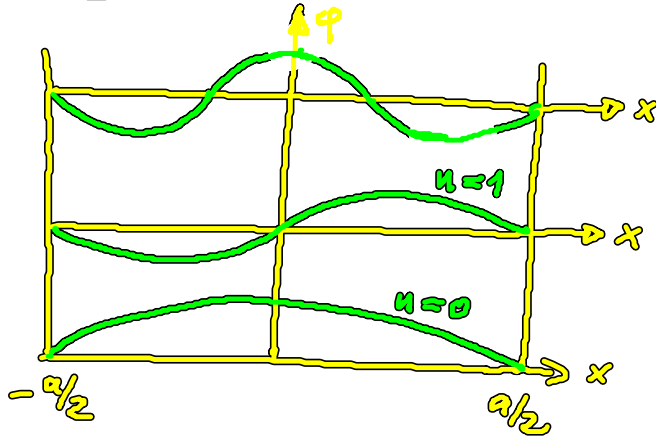
Normierung: $\int_{-a/2}^{a/2} dx |\varphi(x)|^2 = 1$

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx \left\{ \begin{array}{l} A^2 \cos^2 \left(\frac{(2m+1)\pi x}{a} \right) \\ B^2 \sin^2 \left(\frac{2(m+1)\pi x}{a} \right) \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} dx \left\{ \begin{array}{l} A^2 (1 + \cos(2\pi x)) \\ B^2 (1 - \cos(2\pi x)) \end{array} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} A^2 a + \frac{1}{2} A^2 \int_{-(2m+1)\pi}^{(2m+1)\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \cos \phi \\ \frac{1}{2} B^2 a - \frac{1}{2} B^2 \int_{-(2m+1)\pi}^{(2m+1)\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \cos \phi \end{array} \right\}$$

Integraler über vielfache Periode 2π

$$= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} A^2 a \\ \frac{1}{2} B^2 a \end{array} \right\} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \begin{array}{l} A = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \\ B = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \end{array}$$



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

Parität

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

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

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

Also ist mit $\varphi(x)$ auch $\varphi(-x)$ eine Lösung der Schrödinger-gl.

Wegen der Linearität sind dann auch

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

und

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

Lösungen. Diese sind bei Ortspiegelung gerade bzw. ungerade

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

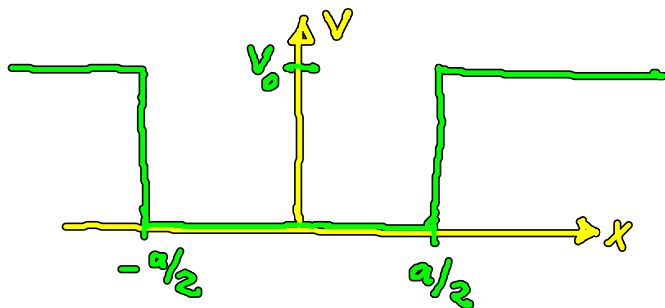
$$\varphi_u(-x) = \varphi(-x) - \varphi(x) = -\varphi_u(x) \quad \underline{\text{ungerade Parität}}$$

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



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

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

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

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

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

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

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

Wegen Normierbarkeit der Wellenfkt.:

$$D = 0 \quad (\text{sonst divergiert } \varphi \text{ für } x \rightarrow \infty)$$

$$D' = 0 \quad (\text{sonst divergiert } \varphi \text{ für } x \rightarrow -\infty)$$

einsetzen in Stetigkeitsbed.:

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

Stetigkeitsbed.

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

$$\varphi'(x+\varepsilon) - \varphi'(x-\varepsilon) = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} dx' \varphi''(x') = \frac{2\varepsilon}{h^2} \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} dx' [V(x') - E] \varphi(x') \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

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

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

⇒ (ii) endlicher Potenzialtopf:
 stetig diff. besser Anschluss des
 Wellenfkt. bei $x = \pm \frac{a}{2}$.