Wiederholung:

Impulszustände:

- $\langle \tilde{\varphi}_{tk} | \tilde{\varphi}_{tk'} \rangle = 2\pi\, \delta(k-k')$
- $\int \frac{dk}{2\pi} | \tilde{\varphi}_{tk} \rangle\langle \tilde{\varphi}_{tk'} | = \mathbb{1}$

Impulswellenfkt.: $\tilde{\psi}(k) = \langle \tilde{\varphi}_{tk} | \psi \rangle$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \int \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k)\, e^{ikx}$$

$$\begin{array}{ccc} \tilde{\psi}(k) & \xleftrightarrow[\text{trafo}]{\text{Fourier-}} & \psi(x) \\ \| & & \| \\ \int dx\, \psi(x)\, e^{-ikx} & & \int \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k)\, e^{ikx} \end{array}$$

- Translationssymmetrie $\Longleftrightarrow$ Impulserhaltung

- Pkt teilchen: $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\, |\dot{\psi}(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \right) |\psi(t)\rangle$$

in Ortsdarstellung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right) \psi(x,t)}$$

<u>Schrödingergl.</u>

$\hookrightarrow$ normierbare Eigenzustände, Eigenenergien:

$$E_n |\psi_n\rangle = H |\psi_n\rangle$$

d.h.

$$\boxed{E_n \psi_n(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right) \psi_n(x)}$$

<u>Stationäre Schrödingergl.</u>

$\hookrightarrow$ Dynamik:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

$$\hookrightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n\rangle$$

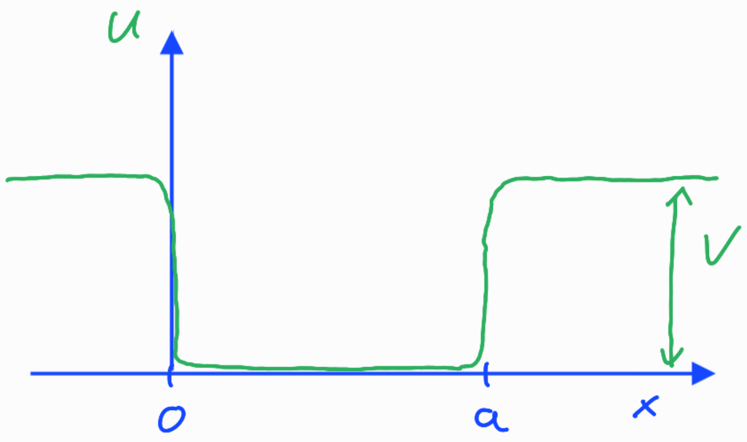
in Ortsdarstellung:

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

$$\hookrightarrow \psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x)$$

Teilchen im Kastenpotenzial

$\rightsquigarrow$ Doppelkastenpotenzial



$$U(x) = \begin{cases} V & : x \notin [0,a] \\ 0 & : x \in [0,a] \end{cases}$$

bestimme normierbare Eigenfkten $\psi_E(x)$:

$$\psi_E''(x) \overset{!}{=} \frac{2m}{\hbar^2}\left(U(x) - E\right)\psi_E(x) \qquad !$$

$0 < E < V$: $(\psi = \psi_E)$

$\underline{\underline{x \leq 0}}$:

$$\psi''(x) = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}_{\varkappa^2 > 0}\,\psi(x)$$

$\rightarrow$

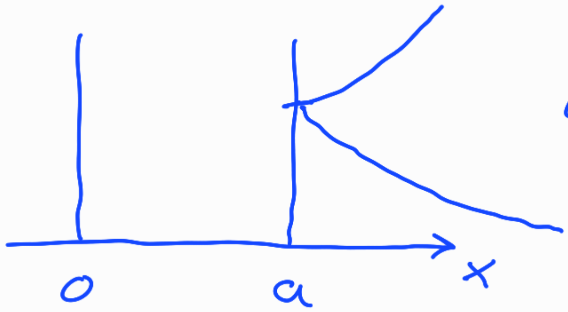
$$\underline{\underline{\psi(x) = \alpha\, e^{+\varkappa x}}} + \cancel{\beta\, e^{-\varkappa x}}$$

$\uparrow$ divergent $x \to -\infty$

$\underline{x > a}$: $\psi''(x) = \varkappa^2 \psi(x)$

$\rightarrow \quad \psi(x) = \tilde{\alpha}\, \cancel{e^{\varkappa(x-a)}} + \tilde{\beta}\, e^{-\varkappa(x-a)}$

divergiert für $x \to +\infty$

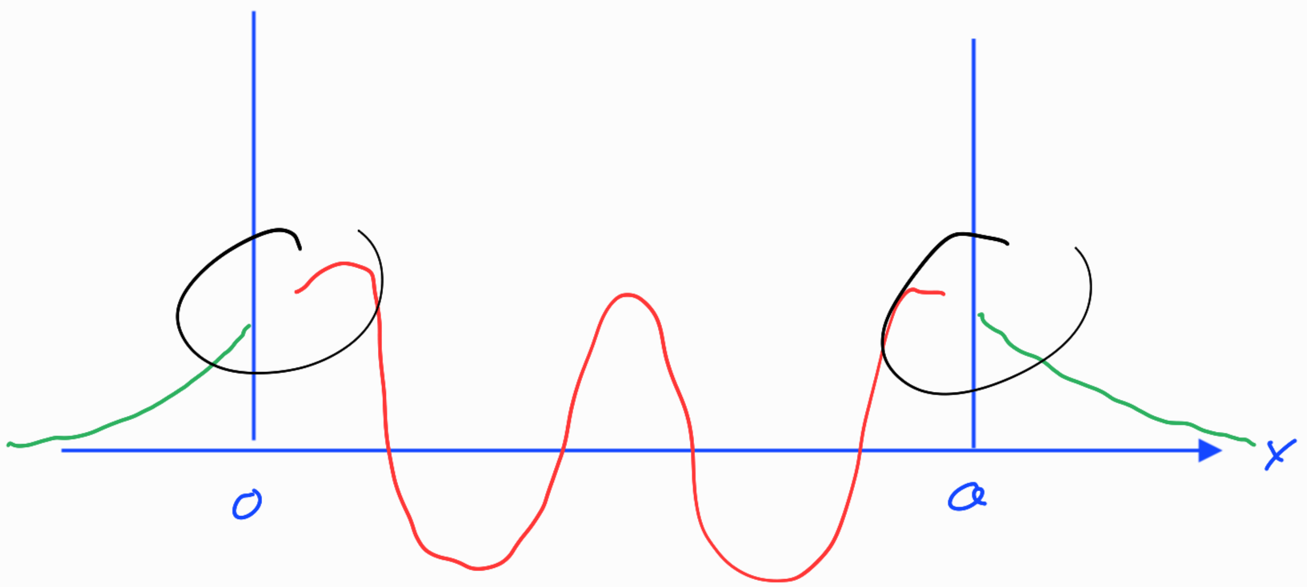


$\underline{0 < x < a}$: $V(x) = 0$

$$\rightarrow \quad \psi''(x) = -\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} E}_{k^2}\, \psi(x) \quad \leftarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\psi_\pm(x) = |\tilde{\varphi}_{\pm\hbar k}\rangle$ ✓

$$\rightarrow \quad \psi(x) = r \sin kx + s \cos kx$$



$\rightarrow$ globale Lösung $\psi(x)$, $x \in \mathbb{R}$ durch

Stetigkeitsbedingungen bei $x=0$ und $x=a$

Γ ψ stetig, ψ' stetig diff., ψ''

insb. $x=0$, $x=a$:

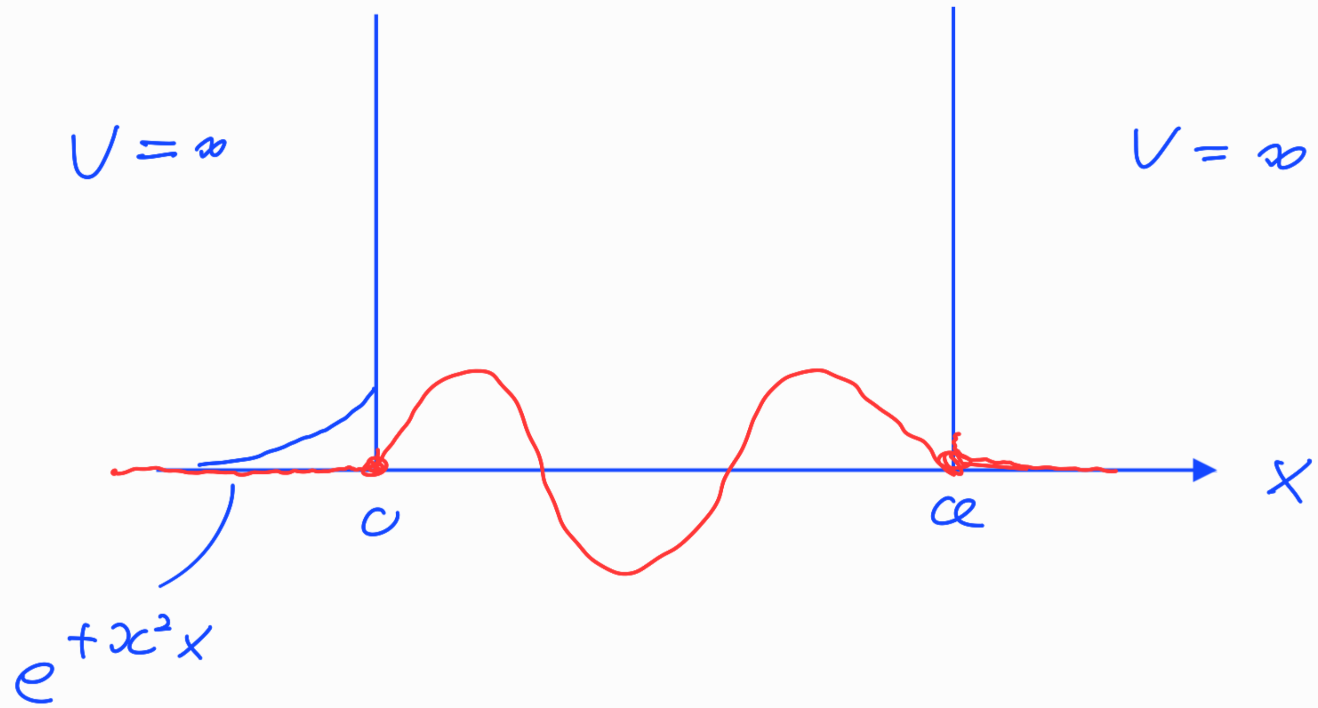
$$\left.\begin{aligned} \psi(0-) &= \psi(0+) \\ \psi'(0-) &= \psi'(0+) \\ \psi(a-) &= \psi(a+) \\ \psi'(a-) &= \psi'(a+) \\ \text{Normierung:} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx &= 1 \end{aligned}\right\} \underline{\underline{5}} \text{ Bedingungen!}$$

$\underline{\underline{5}}$ freie Parameter: α, $\tilde{\beta}$, ν, s, $\underline{\underline{E}}$

$\rightarrow$ Lösungen für diskrete Eigenenergien

E_1, E_2, ... !

Vereinfachung: $V \rightarrow \infty$!



$\varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar} V \to \infty$ $\quad\rightarrow\quad$ $\psi(x) = 0$

für $x < 0, \quad x > a$!

$\rightarrow$ $\psi(x)$ Lsgen von $\psi''(x) = -k^2 \psi(x)$

für $x \in \,]0, a[$

unter Randbed. $\psi(0) = \psi(a) = 0$!

$\rightarrow$ $\psi(x) = r \sin kx + s \cancel{\cos kx}$

$\sin ka = 0$!

$\rightarrow$ $ka \overset{!}{=} \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

$\longrightarrow$

Energieeigenfunktionen

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin(k_n x) \qquad k_n = \frac{\pi}{a}\cdot n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots}$$

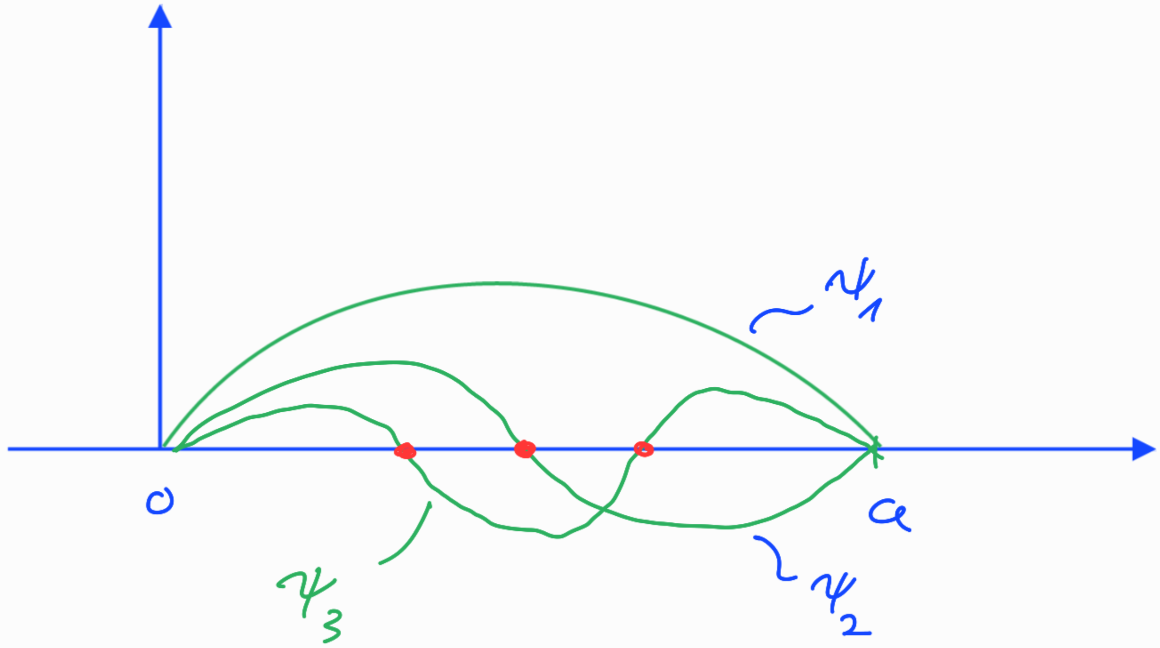
Energieeigenwert

$$E_n = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}\cdot n^2$$

Normierung:

$$1 \overset{!}{=} \int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \underbrace{\int_0^a \sin^2(k_n x)\, dx}_{=\int_0^a \cos^2(k_n x)\, dx}$$

$$= \frac{1}{a}\int_0^a \underbrace{(\sin^2 k_n x + \cos^2 k_n x)}_{=1} dx = 1 \checkmark$$



Wellenfunktion ψ_n zur Energie E_n

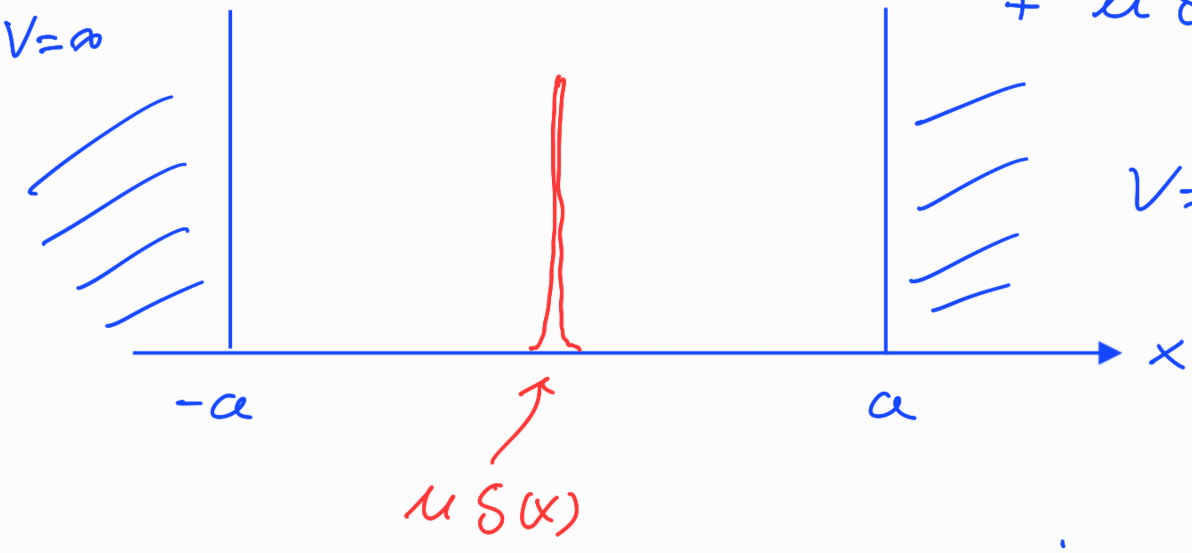
besitzt $(n-1)$ Nullstellen

„Knoten"

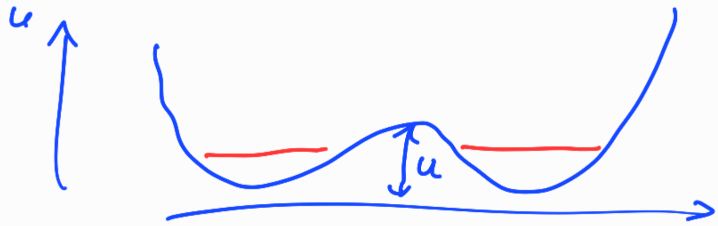
allgemein: "Knotensatz"

[vgl: A. Messiah Bd 1, S. 104]

Teilchen im Doppelkastenpot. : $2\times$ Kasten $+ u\,\delta(x)$!



Γ einfaches Modell für Teilchen im Doppelmuldenpotential:



$E < u$:

Grundzust: klassisch: Teilchen links oder rechts

QM: links und rechts !

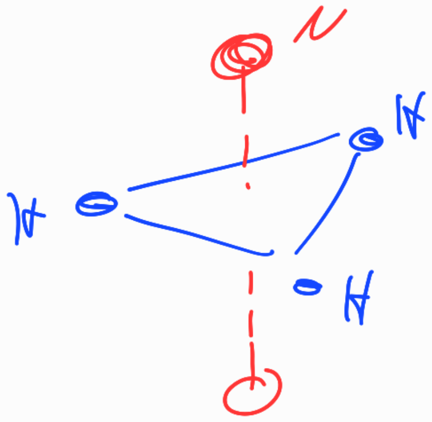
Anregungen: klassisch: harm. Schwingungen innerhalb einer Mulde

$\rightarrow \Omega$

QM: Oszillation zwischen den Mulden !

Frequenz $\omega \ll \Omega$

Γ NH_3:



Messungen: klassisch: ✓

QM: „je häufiger gemessen wird, desto klassischer das Verhalten"

Quanten-Zeno-Effekt!

$$U(x) = \begin{cases} \infty : & |x| > a \\ u\,\delta(x) & |x| < a \end{cases}$$

$(\psi = \psi_E)$

Lösungen $\psi(x)$ der stat. SGL:

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(u\,\delta(x) - E\right)\psi(x)$$

für $x \in \,]-a, a[$, R.B. $\psi(\pm a) = 0$!

Lösungen $\psi(x)$ der stat. SGL:

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(u\,\delta(x) - E\right)\psi(x)$$

für $x \in]-a, a[$, R.B. $\psi(\pm a) = 0$!

für $x \neq 0$: $\psi''(x) = -k^2\psi(x)$

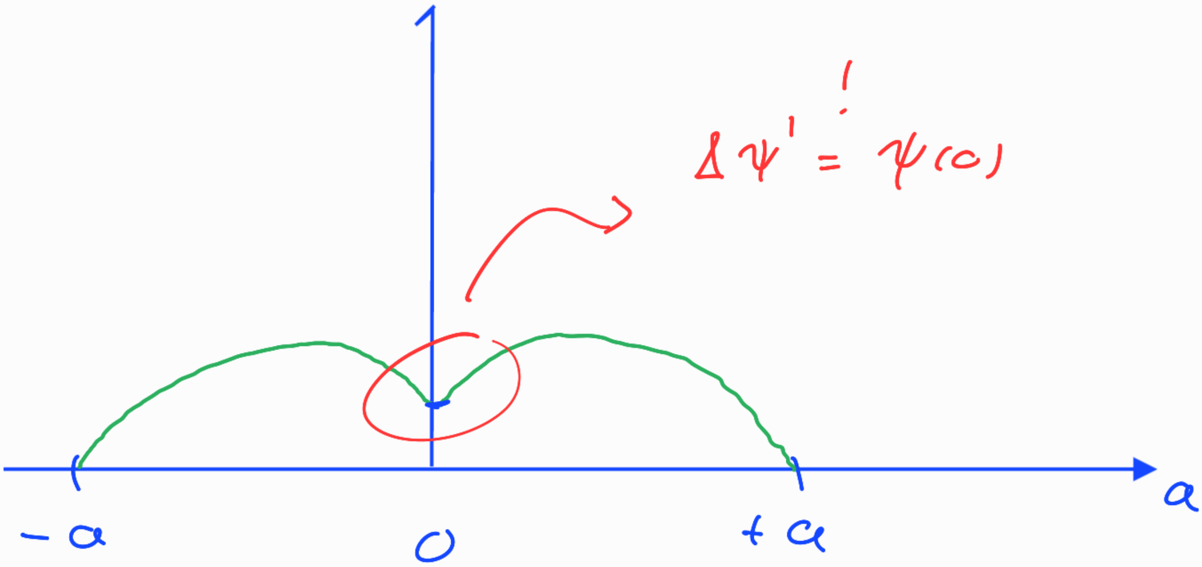
$$\Rightarrow \psi(x) = r\sin kx + s\cos kx \checkmark$$

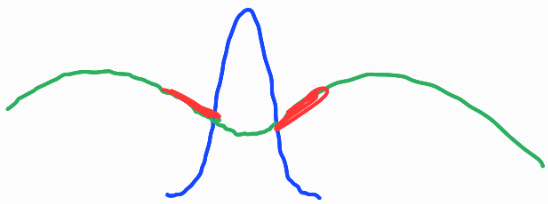
$$k = 2mE/\hbar^2$$

Verhalten der Lsg. bei $x = 0$: $(\varepsilon \to 0)$

$$\underbrace{\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi''(x)\,dx}_{\psi'(\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)} \overset{!}{=} \frac{2mu}{\hbar^2}\underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\,\psi(x)\,dx}_{\psi(0)} - k^2\underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx}_{=0}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta\psi' \overset{!}{=} \frac{2mu}{\hbar^2}\,\psi(0)} \quad (*)$$





<u>Ansatz:</u>

$$\psi(x) = c \sin\left(k\left(|x| + b\right)\right)$$

- $\psi(0) = c \sin kb$

$$\psi'(0\pm) = \pm c k \cos kb$$

(*) $$\cancel{2}\cancel{c} k \cos kb \overset{!}{=} \frac{\cancel{2}m\alpha}{\hbar^2} \cancel{c} \sin kb$$

$\Leftrightarrow$ $$\tan kb \overset{!}{=} \frac{k\hbar^2}{m\alpha} \leftarrow \alpha \text{ groß!}$$

$\Leftrightarrow$ $$\cancel{k} b = \frac{\cancel{k}\hbar^2}{m\alpha} \rightsquigarrow b \overset{!}{=} \hbar^2/m\alpha \ !$$

- Randbedingungen: $\psi(a) = \psi(-a) = 0$

$\rightarrow \quad 0 = \sin(k(a+b))$

$\rightarrow \quad k(a+b) \overset{!}{=} \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

$\rightarrow$ Energieeigenfunktionen:

$$\psi_n(x) = c_n \sin(k_n(|x| + b))$$

$$k_n = \frac{\pi}{a+b} \cdot n$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi}{2m} \frac{n^2}{(a+b)^2}$$