

gegeben:

Schrodingergl. für Punktteilchen der Masse m :

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

in Ortsdarstellung:

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

$$\left(\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right)$$

Lösungen $|\psi(t)\rangle$?

Standardmethode:

$$(I) \quad H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$\rightarrow$ Energieeigenzust. $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots$

Eigenenergien $E_0, E_1, \dots$

in Ortsdarstellung:

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

$\rightarrow$ Energieeigenfunktionen ^(*) $\psi_0(\vec{x}), \psi_1(\vec{x}), \dots$

Eigenenergien $E_0, E_1, \dots$

*) normierbar

$$(\quad | \psi_n \rangle \quad \rightarrow \quad \psi_n(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_n \rangle \quad)$$

(II) Lösung $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle$

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

in Ortsdarst.:

Lösung $\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{x})$

zum Anfangswellfkt. $\psi(\vec{x}, 0) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x})$

⌈ $i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \right)$

$$= \sum_n c_n \underline{E_n} e^{-iE_n t/\hbar} \underline{|\psi_n\rangle}$$

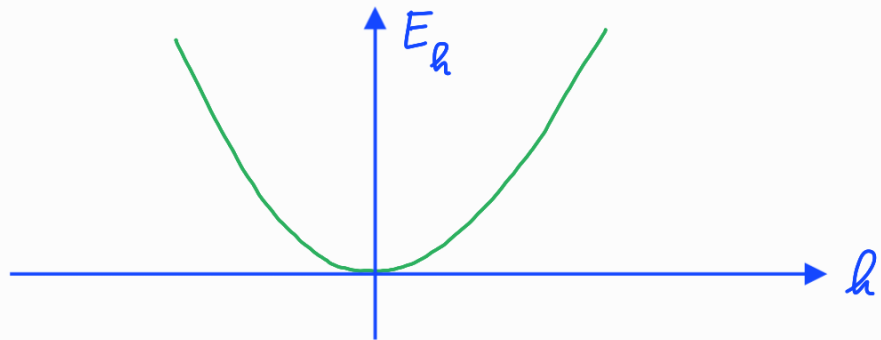
$$= \underline{H} \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \underline{|\psi_n\rangle}$$

$$= H |\psi(t)\rangle$$

└

1) freies Teilchen: $H = \frac{1}{2m} p^2$

→ Impulseigenzust. $|X_p\rangle$ zugleich Energie-eigenzustand zur Energie $E_p = \frac{p^2 \hbar^2}{2m}$



2 → Energiedarstellung = Impulsdarstellung

$$2 \rightarrow |\psi(0)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \tilde{\psi}(p) |X_p\rangle$$

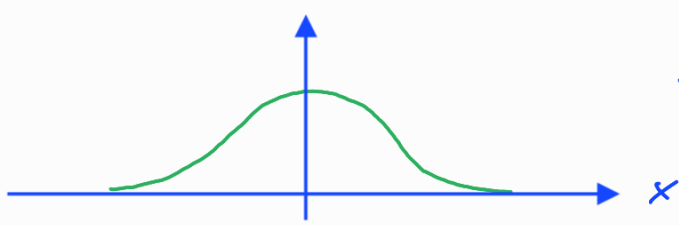
$$\xrightarrow{t} |\psi(t)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \tilde{\psi}(p) e^{-iE_p t/\hbar} |X_p\rangle$$

in Ortsdarstellung:

$$\psi(x,0) = \int \frac{dp}{2\pi} \tilde{\psi}(p) e^{ipx}$$

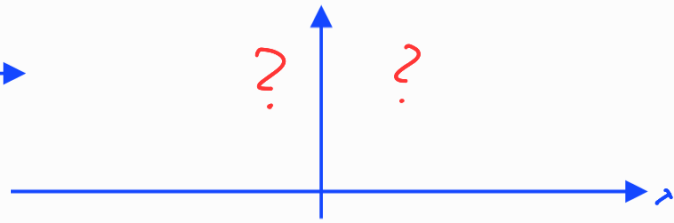
$$\xrightarrow{t} \psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi} \tilde{\psi}(p) e^{-iE_p t/\hbar} e^{ipx}$$

Beispiel



$$\psi(x,0) = \kappa e^{-x^2/4\sigma^2}$$

$\xrightarrow{t}$



$$\psi(x,t) = ?$$

$$\psi(x,0) \xrightarrow{\text{F.T.}} \tilde{\psi}(h) = \tilde{\kappa} e^{-\sigma^2 h^2}$$

$$\text{d.h. } \psi(x,0) = \tilde{\kappa} \int \frac{dh}{2\pi} e^{-\sigma^2 h^2} e^{ihx} \quad E_h = \frac{\hbar^2 h^2}{2m}$$

$$\downarrow t$$
$$\psi(x,t) = \tilde{\kappa} \int \frac{dh}{2\pi} e^{-\sigma^2 h^2} e^{-i \frac{\hbar^2}{2m} h^2 t} e^{ihx}$$

$$= \tilde{\kappa} \int \frac{dh}{2\pi} e^{-\underbrace{(\sigma^2 + i \frac{\hbar^2}{2m} t)}_{=: a} h^2 + i x h} \quad \underbrace{e^{i x h}}_{=: b}$$

$$= \tilde{\kappa} e^{-x^2/4|a|}$$

Gauß

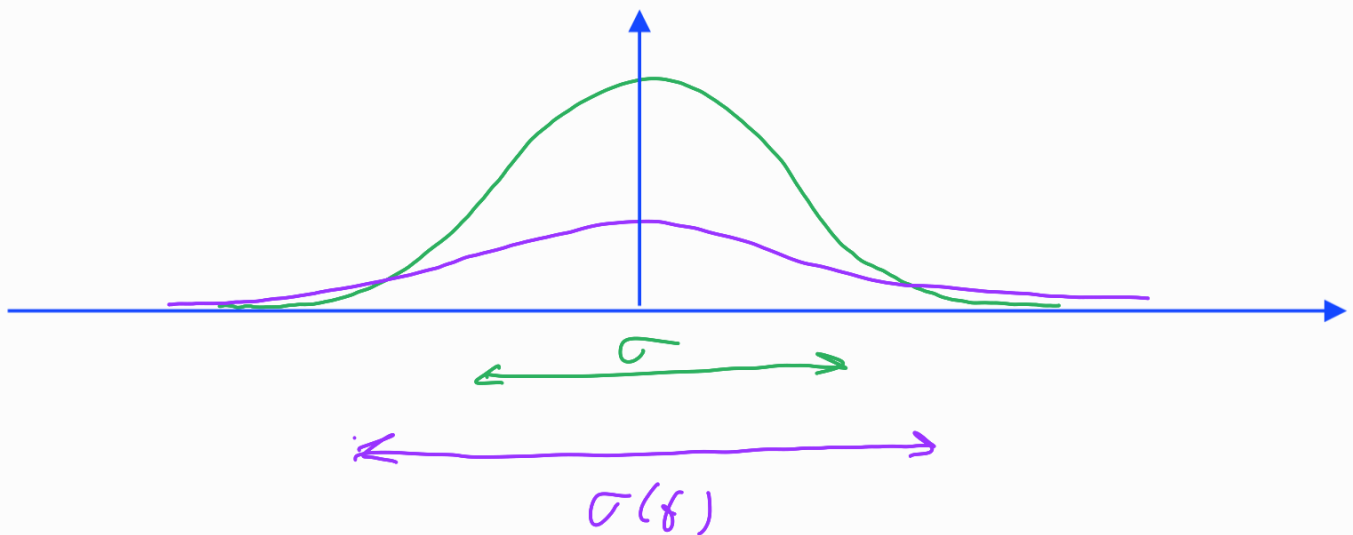
$$|a| = \left(\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \right)^{1/2} = \sigma^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m\sigma^2} \right)^2 t^2}$$
$$=: \sigma^2(t)$$



$$\text{d.h. } \psi(x, t) = \tilde{c} e^{-\frac{x^2}{4\sigma(t)}}, \quad \tilde{c} \sim \frac{1}{\sqrt{\sigma(t)}}$$

$$\text{mit } \sigma(t) = \sigma \sqrt[4]{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}$$

$$\tau = 2m\sigma^2/\hbar$$



$$\Gamma \quad \text{z.B. 1) } m = m_e = 10^{-30} \text{ kg}$$

$$\sigma = 10^{-10} \text{ m}$$

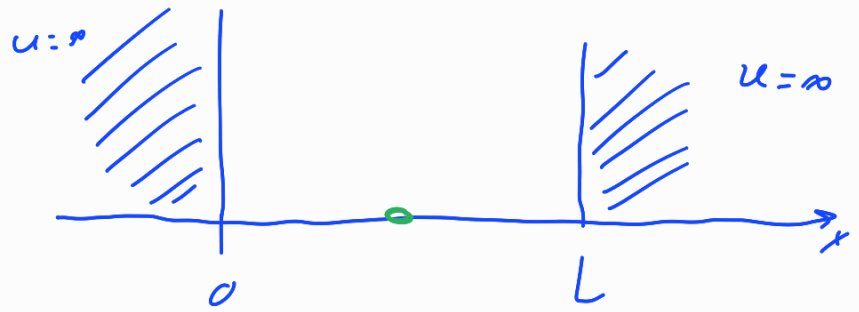
$$\tau \simeq 2 \cdot 10^{-16} \text{ s} \quad ;$$

$\rightarrow t = 10^{-34} \text{ s}$

$$2) \quad m = 1 \text{ g} = 10^{-3} \text{ kg}, \quad \sigma = 1 \text{ mm} = 10^{-3} \text{ m}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \tau &= 2m\sigma^2/\hbar = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-6} / 10^{-34} \text{ s} \\ &= 2 \cdot 10^{25} \text{ s} \end{aligned}$$

2) Teilchen im Kasten:



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

Energieeigenfunktion $\psi_n(x)$ mit En. E_n :

- (i) stetig, insb. bei $x=0$, $x=L$
- (ii) verschwindend für $x < 0$, $x > L$
- (iii) erfüllt freie SGL für $0 < x < L$

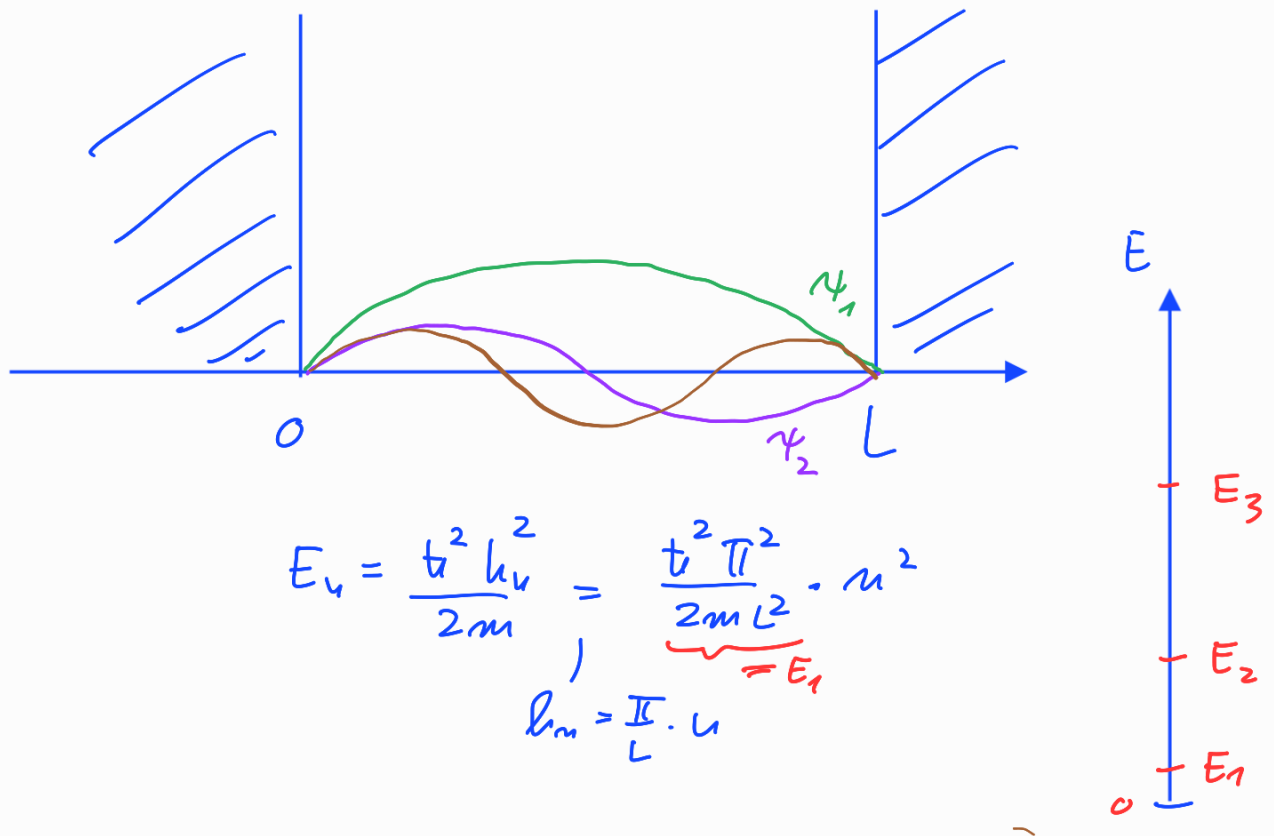
$$\hookrightarrow \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) & : x \in [0, L] \\ 0 & : x \notin [0, L] \end{cases}$$

mit $k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n$, $n = 1, 2, 3, \dots$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad \checkmark$$

Γ (ii) ✓ (i) ✓ (iii) : $\psi_n(x)$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_H \psi_n(x) = \underbrace{+ \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2}_{= E_n} \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x}_{\psi_n(x)} \quad \checkmark$$

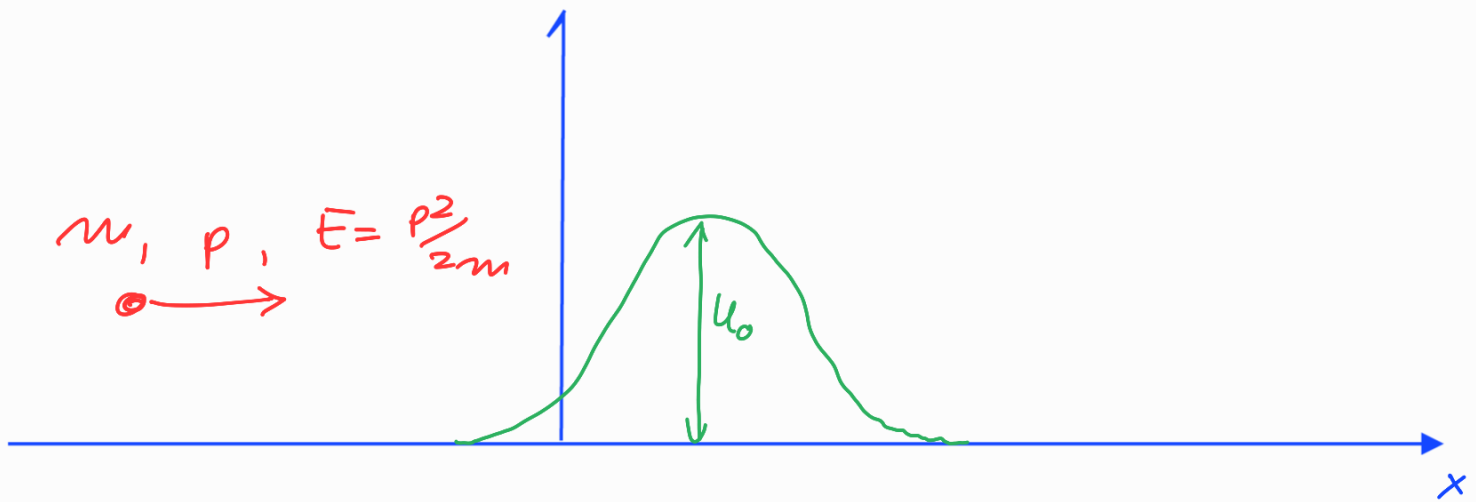


Beschränkung auf endlichen Bereich

→ Energiequantelung!

→ Quanten dot = Quantenpunkt

Reflexion und Transmission an Potenzialschwellen



Teilchen aus $-\infty$ kommend, Impuls $p > 0$

$$E = \frac{p^2}{2m} < U_0 :$$

klassisch :

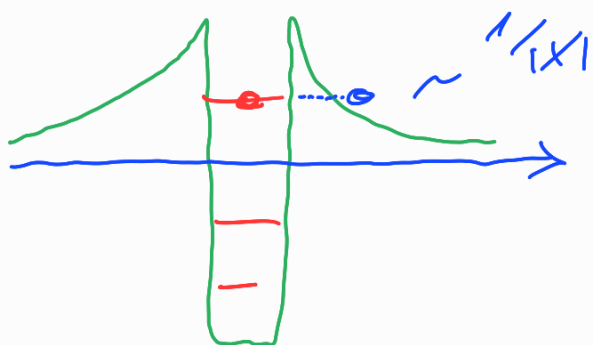
- Reflexion mit Wkt 1;
- keine Transmission

QU :

- Reflexion mit Wkt $\neq 1$!
- Transmission mit Wkt > 0

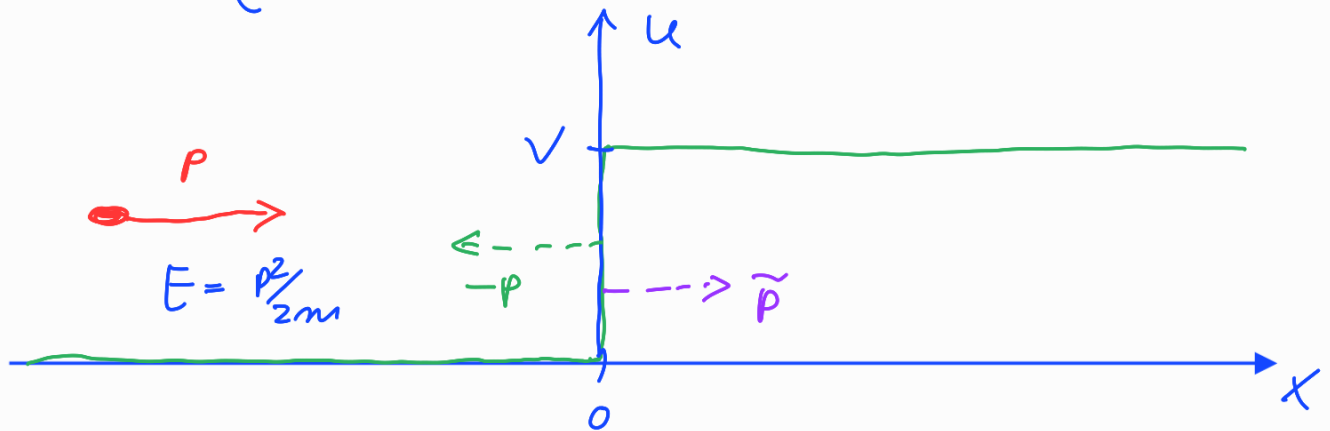
Tunneleffekt !

(α -Zerfall , Kernfusion, Feldemission ...)



Reflexion und Transmission an Potentialstufe

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



Bestimmung einer Energieeigenfunktion $\psi_E(x)$ mittels

Streuansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1e^{ikx} + \underline{r}e^{-ikx} & : x < 0 \\ t e^{i\tilde{k}x} & : x > 0 \end{cases} \quad k > 0$$

• $k, \tilde{k}$ bestimmt durch S.C. für $x < 0$, bzw. $x > 0$

• r, t bestimmt durch Stetigkeit von

(i) $\psi(x)$ in $x=0$

(ii) $\psi'(x)$ in $x=0$

stat. S.C.: $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \underline{U(x)} \psi(x) = E \psi(x)$

für $x < 0$: $U(x) = 0$:

$$\rightarrow \psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$\psi(x) = e^{i\hbar x}$$

$$-\underline{\hbar^2} e^{i\hbar x} = -\underline{\frac{2mE}{\hbar^2}} e^{i\hbar x}$$

$$\text{d.h. } \hbar = \sqrt{2mE} / \tau$$

für $x > 0$: $U(x) = V$

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x)$$

$$\psi_t = e^{i\tilde{\hbar}x} : \quad -\tilde{\hbar}^2 e^{i\tilde{\hbar}x} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) e^{i\tilde{\hbar}x}$$

$$\tilde{\hbar} = \sqrt{2m(E - V)} / \tau$$

Stetigkeitsbed.

$$(i) \quad 1 + r = t$$

$$(ii) \quad i\hbar - r i\hbar = t i\tilde{\hbar}$$

$$(i) \quad 1 + r = t$$

$$(ii) \quad \underline{h - r h} = \tilde{h} t = \underline{\tilde{h} (1 + r)}$$

$$\rightarrow r = \frac{h - \tilde{h}}{h + \tilde{h}}, \quad \begin{aligned} h &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ \tilde{h} &= \sqrt{2m(E-V)} / \hbar \end{aligned}$$

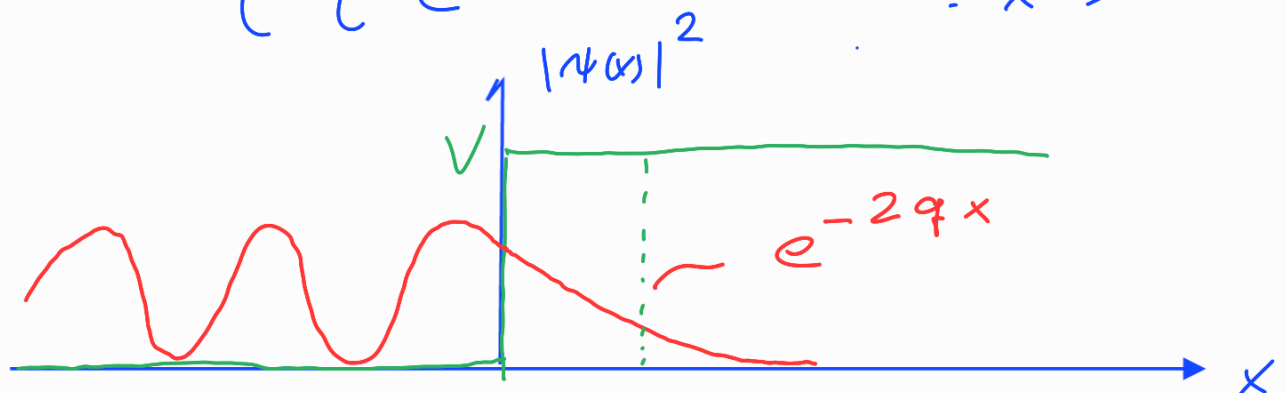
Reflexions u. ko. : $R = |r|^2$

Fallunterscheidung:

$$\underline{E < V} : \quad \tilde{h} = i \underbrace{\sqrt{2m(V-E)} \cdot \frac{1}{\hbar}}_{q \in \mathbb{R}} = i q$$

$$\rightarrow R = |r|^2 = \left| \frac{h - iq}{h + iq} \right|^2 = \frac{h^2 + q^2}{h^2 + q^2} = 1 !$$

$$\rightarrow \psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & : x < 0 \\ t e^{-qx} & : x > 0 \end{cases}$$



$$\underline{\underline{E > V}} : \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\tilde{k} = \sqrt{2m(E-V)} / \hbar$$

$$\rightarrow R = |\mathcal{R}|^2 = \left| \frac{k - \tilde{k}}{k + \tilde{k}} \right|^2$$

$$= \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-V}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V}} \right|^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{\frac{E-V}{E}}}{1 + \sqrt{\frac{E-V}{E}}} \right)^2$$

$$= \begin{cases} 1 - 4\sqrt{\frac{E-V}{E}} & : E-V \ll E \\ \left(\frac{1}{4} \frac{V}{E} \right)^2 & : E \gg V \end{cases}$$