Wellenmechanik: (unvollständige) Zusammenfassung

Schrödinger-Gl.: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\psi + V\psi = i\hbar\,\partial_t\psi$$

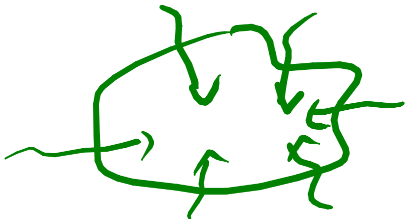
Wahrscheinlichkeitsdichte: $$|\psi(x,t)|^2\,d^3x = \begin{cases}\text{Wschk., Teilchen}\\ \text{zur Zeit } t \text{ zwischen}\\ x \text{ und } x+dx \text{ zu finden}\end{cases}$$

Normierung der WF: $$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x\,|\psi(x,t)|^2 = 1$$

$\boxed{\text{falls nicht normierbar: bilde Wellenpakete}}$

Wahrscheinlichkeitsstrom: $$\vec{j}(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi)\psi\right]$$

Erhalt der Wschk-Dichte: $$\partial_t|\psi|^2 + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$



$$\frac{d}{dt}\int d^3x\,|\psi|^2 = -\oint \vec{j}\cdot d\vec{A}$$

Erwartungs-Werte

Ort: $\langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \; \psi^* \, \vec{x} \, \psi$

Impuls: $\langle \vec{p} \rangle = \int d^3x \; \psi^* \underbrace{(-i\hbar \vec{\nabla})}_{\equiv \hat{\vec{p}}} \psi$

$\equiv \hat{\vec{p}}$ Impuls-Operator

Allgemein: $\langle A(\vec{x}, \vec{p}) \rangle = \int d^3x \; \psi^* A(\vec{x}, -i\hbar\vec{\nabla}) \psi$

Unschärfe-Relation: $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$

wobei: Varianz: $\sigma_A \equiv \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

Zeitunabhängiges Potential: $V(x,t) = V(x)$

Separation der Variablen: $\psi_n(x,t) = \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$

Zeitunabhängige SG: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + V\right]\psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$

(beschreibt stationären Zustand)

falls Spektrum diskret ist

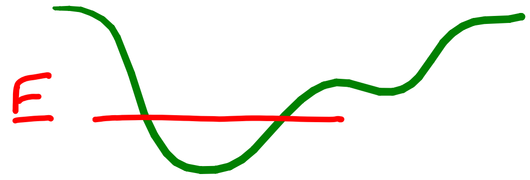
Allgemeine Lösung: $\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$

$c_n = \int \psi_n^*(x)\, \psi(x,0)\, dx$

Eigenfunktionen sind vollständig: $\sum_n \psi_n^*(x,t)\, \psi_n(x',t) = \delta(x - x')$

und können orthonormal gewählt werden: $\int dx\, \psi_n^*(x)\, \psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}$

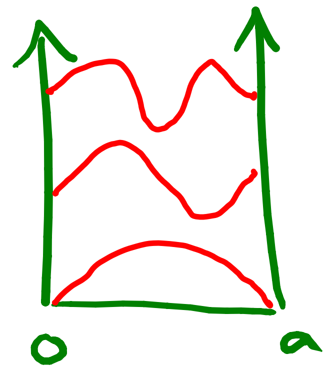
Gebundenes Teilchen: $E < V(\pm\infty)$



Randbedingung: $\psi \to 0$ für $x \to \pm\infty$

liefert diskrete Energien E_n, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Beispiele:

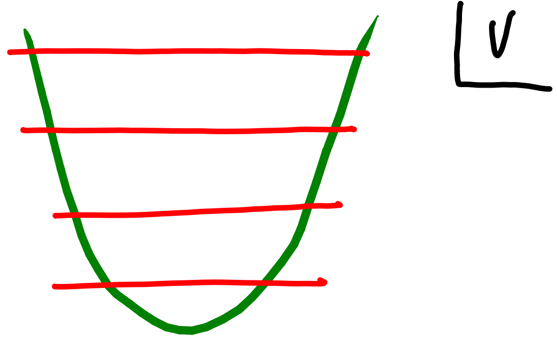


1. Unendlich tiefer Potenzialtopf:

Eigenenergien: $$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2}$$

Eigenfunktionen: $$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

2. Harmonischer Oszillator:



SG: $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\right]\psi = E\psi$$

Leiteroperatoren: $$\begin{Bmatrix} a^+ \\ a \end{Bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(\mp ip + m\omega x\right)$$

SG: $$\hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

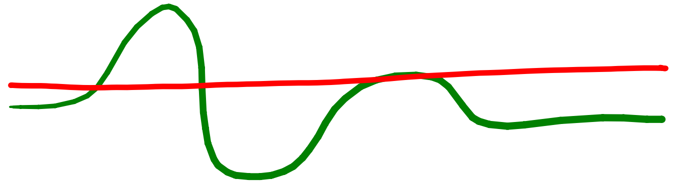
Eigenenergien: $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Eigenfunktionen: $$\psi_n(x) = \underbrace{A_n}_{\text{Normierung}} \left(a^+\right)^n \psi_0(x)$$

GrundzustandsWF: $$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Ungebundenes Teilchen:

[E > V(+∞) oder V(-∞)]



Freies Teilchen: SG: $\partial_x^2 \psi = -k^2 \psi$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

WF: ebene Welle: $\psi_k(x,t) = A\, e^{i(kx - Et)}$

Ebene Welle ist nicht normierbar ⇒ bilde Wellenpakete

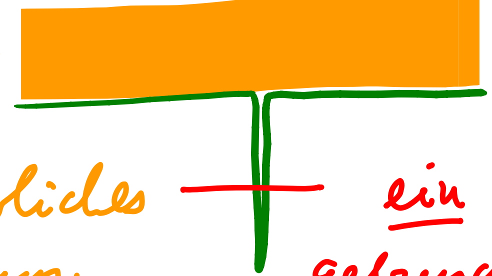
Wellenpaket: $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i(kx - Et)}$

$\phi(k)$ via Fourier-Transformation: $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, \psi(x,0)\, e^{-ikx}$

Allgemeinere Form: $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i[kx - \omega(k)t]}$

Gruppengeschw.: $v_{gr} = \frac{d\omega}{dk}$; Phasengeschw.: $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$

δ-Topf: $\quad V(x) = -\alpha\,\delta(x)$



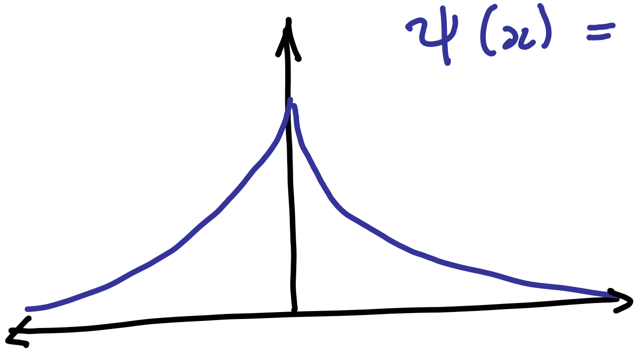
kontinuierliches Spektrum ungebundener Zustände

ein gebundener Zustand

gebundener Zustand:

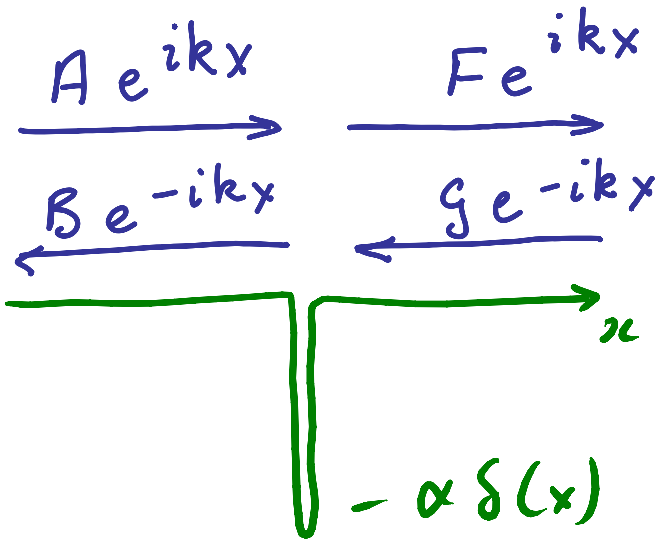
$$\psi(x) = B\,e^{-\kappa|x|}$$

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$



Streuzustände:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



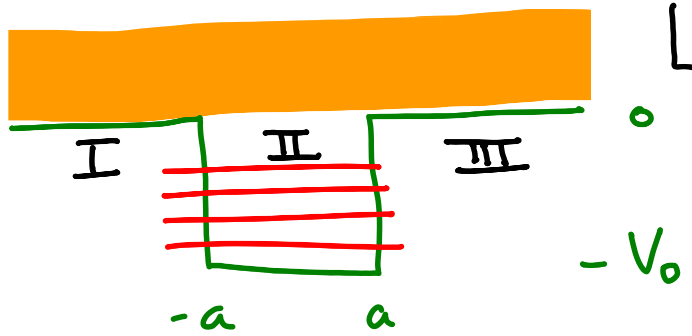
Koeffizienten bestimmt durch

- Stetigkeit von ψ bei $x=0$
- Normierung

Transmissionskoeff.: $\quad T = \dfrac{|F|^2}{|A|^2} \quad \dfrac{1}{1 + m\alpha^2/2\hbar^2 E}$

Reflexionskoeff.: $\quad R = \dfrac{|B|^2}{|A|^2} = 1 - T$

Endlich tiefer Potenzialtopf



gebundene Zustände: $E < 0$,

SG in I, III: $\partial_x^2 \psi = \kappa^2 \psi$ $\quad \kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$

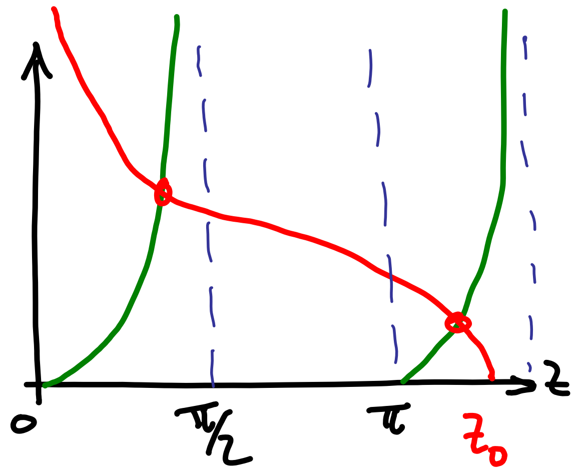
II: $\partial_x^2 \psi = -\ell^2 \psi$ $\quad \ell = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$

Lösen, mit Stetigkeit von ψ und $\partial_x \psi$ bei $x = \pm a$.

Liefert Selbstkonsistenzbedingung:

$$\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}, \quad z = \ell a$$

$$z_0 = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$$



Eigenenergien für tiefen, breiten Topf: $E_n \cong -V_0 + \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m(2a)^2}$