• Eine Wellenfunktion, die $\underline{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$ erfüllt sollte einem klassischen Teilchen am nähesten sein, da die Unschärfe so klein wie möglich ist, und diese klassisch für $\hbar \to 0$ verschwindet.

* Wie kann man solche ψ mit "=" charakterisieren?

– bei der Herleitung der Unschärferelation haben wir gesehen:

S. 19: $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\,(x - \langle x\rangle)\left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p}\rangle\right)\psi(x)$ soll rein imaginär sein damit "="

– beim Beweis der Schwarzschen Ungleichung haben wir gesehen:

$$0 \leq f(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, [u^*(x) - \lambda^* v^*(x)][u(x) - \lambda v(x)]$$

d.h. wenn $0 = f(\lambda_{min})$ muß für λ_{min} $|u(x) - \lambda_{min} v(x)|^2 = 0 \;\forall x$ gelten,

also $\boxed{u(x) = \lambda_{min}\, v(x)}$

$\Rightarrow$ weil S. 19 $\quad u(x) = \psi(x)(x - \langle x\rangle)$, $\quad v(x) = \left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p}\rangle\right)\psi(x)$

für $\lambda_{min} \neq 0$. $\stackrel{!}{=} \dfrac{u(x)}{\lambda_{min}} = \dfrac{\psi(x)(x - \langle x\rangle)}{\lambda_{min}}$

s.o.

$$0 = \mathrm{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)(x - \langle x\rangle)\left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p}\rangle\right)\psi(x)$$

$$= \mathrm{Re}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \underbrace{(x - \langle x\rangle)^2}_{\lambda_{min}}\, \psi(x)\right\} = (\Delta x)^2\, \mathrm{Re}\left(\frac{1}{\lambda_{min}}\right)$$

d.h. λ_{min} ist rein imaginär, def also $\lambda_{min} = \dfrac{2a^2}{i\hbar}$, ferner setze $\langle \hat{p}\rangle = \hbar k_0$, $\langle x\rangle = x_0$

$$\Rightarrow \quad v(x) = \frac{1}{\lambda_{min}} u(x) \Leftrightarrow \left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p}\rangle\right)\psi(x) = \frac{i\hbar}{2a^2}(x - \langle x\rangle)\psi(x)$$

$$\Rightarrow \quad -i\hbar \frac{d\psi}{dx} = \frac{i\hbar}{2a^2}(x - x_0)\psi + \hbar k_0 \psi(x)$$

$$\stackrel{\cdot \frac{i}{\hbar}}{\Leftrightarrow} \quad \frac{d\psi}{dx} = \left[-\frac{1}{2a^2}(x - x_0) + i k_0\right]\psi(x) = \left(\frac{d}{dx}\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + i k_0 x + \text{const}\right]\right)\psi(x)$$

$\Rightarrow$ Lösung $\psi(x) = D \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + ik_0x\right]$

$$|\psi(x)|^2 = |D|^2 \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right]$$

$\times$ dies ist genau das Beispiel eines gaußschen Wellenpaketes von Ü 1.1 (s. S. 21), d.h. klassische Teilchen $\approx$ minimales gaußsches Wellenpaket.

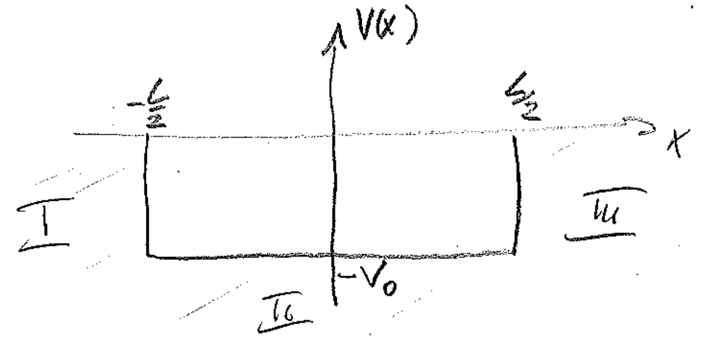
zum Vergleich: ein monochromatischer Strahl von qm Teilchen $\hat{=}$ ebene Welle.

2. Eindimensionale Wellenmechanik

In diesem Kapitel betrachten wir verschiedene Beispiele für Lösungen der zeitunabhängigen Schrödi in einer Raumdimension

$\rightarrow$ starke (mathematische) Vereinfachung, enthält wichtige qm Effekte!

2.1 Teilchen im Kastenpotential [Münster 3.1, 3.2.1, Fließbach II.11, III.20]



- in der klassischen Mechanik sind alle Energien $E > -V_0$ erlaubt, und für $E < 0$ kann sich ein klass. Teilchen nur zwischen $-\frac{L}{2} \leq x < \frac{L}{2}$ aufhalten. In der QM ist beides nicht der Fall, wie wir sehen werden!

zeitunabh. Schrödi in 1D: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_E(x) = E\psi_E(x)$

$$\text{mit } V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } |x| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad V_0 > 0$$

gesucht: Lösung der Schrödi $\psi_E(x)$ $\forall x \in \mathbb{R}$, mit $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_E(x)|^2 = 1$

Strategie: Wir suchen zunächst getrennte Lösungen in den 3 Bereichen I: $x < -\frac{L}{2}$, II $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ und III $x > \frac{L}{2}$.
Diese verbinden wir dann durch gewisse Anschlußbedingungen bei $x = -\frac{L}{2}$ und $x = +\frac{L}{2}$.

→ Insbesondere muß für unser gegebenes Potential $V(x)$ das so erhaltene $\psi_E(x)$ und dessen Ableitung $\psi_E'(x)$ bei $x = \pm\frac{L}{2}$ stetig sein:

Annahme daß nicht: i) $\psi_E^I(x) \neq \psi_E^{II}(x)$ für $x = x_0 = -\frac{L}{2}$

oder ii) $\psi_E^I(x)' = \psi_E^{II}(x)'$

d.h. i) $\psi_E^{II}(x) = \psi_E^I(x) + \beta\,\Theta(x - x_0)$, β Sprung bei x_0

$\Rightarrow \psi_E^{II}(x)' = \psi_E^I(x)' + \beta\,\delta(x - x_0)$

$\psi_E^{II}(x)'' = \psi_E^I(x)'' + \beta\,\delta'(x - x_0)$ → aber unser $V(x)$ enthält kein $\delta'(x - x_0)$, also $\beta = 0$.

einsetzen in Schrödi

genauso ii) $\psi_E^{II}(x)' = \psi_E^I(x)' + \alpha\,\Theta(x - x_0)$, α Sprung in der Abl. bei x_0

$\psi_E^{II}(x)'' = \psi_E^I(x)'' + \alpha\,\delta(x - x_0)$

einsetzen in Schrödi, $V(x)$ hat keinen δ-Anteil $\Rightarrow \alpha = 0$

* Wir betrachten nur $E \leq 0$ in diesem Unterkapitel, also gesucht sind alle gebundenen Zustände.

Bereich I : $x < -\frac{L}{2}$: $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) = E\,\psi_E(x)}$

→ wir führen folgende Parametrisierung für $E \leq 0$ ein: $\boxed{E = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m}}$ mit $\varkappa \geq 0$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\psi_E''(x) = \varkappa^2 \psi_E(x)}, \text{ Ansatz } \boxed{\psi_E^{I}(x) = A e^{\varkappa x} + B e^{-\varkappa x}}$$

* Normierbarkeit geht nur wenn $\psi(x) \to 0$ für $x \to -\infty \Rightarrow B = 0$.

Bereich III: $x > \frac{L}{2}$, $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) = E\psi_E(x)\right)$ genau wie I, verwende $\varkappa$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_E''(x) = \varkappa^2 \psi_E(x)}, \text{ Ansatz wie oben } \boxed{\psi_E^{III}(x) = C e^{\varkappa x} + D e^{-\varkappa x}}$$

hier Normierbarkeit für $\psi(x) \to 0$ bei $x \to +\infty$, d.h. $C = 0$.

Bereich II: $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$, mit V_0 trägt bei, d.h.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V_0\right)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \Leftrightarrow \psi_E''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\psi_E(x)$$

$\to$ benutze Parametrisierung $\boxed{E + V_0 = +\frac{\hbar^2}{2m}k^2}$ mit $k \geq 0$,

dies ist ok für $0 \geq E > -V_0$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_E''(x) = -k^2 \psi_E(x)} \quad \text{Ansatz } \psi_E^{II}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

* aus der Normierbarkeit folgt hier nichts für die Koeff. F und G.

- Aus den Anschlussbed. erhalten wir Beziehungen zwischen A, D, F, G und eine Gl. für E:

Stetigkeit bei $x = \pm\frac{L}{2}$: • $\psi_E^{I}(-\frac{L}{2}) \overset{!}{=} \psi_E^{II}(-\frac{L}{2})$

$$\Leftrightarrow A e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = F e^{-ik\frac{L}{2}} + G e^{+ik\frac{L}{2}} \qquad \text{(i)}$$

sowie • $\psi_E^{II}(+\frac{L}{2}) \overset{!}{=} \psi_E^{III}(+\frac{L}{2})$

$$\Leftrightarrow F e^{+ik\frac{L}{2}} + G e^{-ik\frac{L}{2}} = D e^{-\varkappa\frac{L}{2}} \qquad \text{(ii)}$$

Stetigkeit der Ableitung bei $x = \pm\frac{L}{2}$:

- $\psi_E^{I}(-\frac{L}{2})' = \psi_E^{II}(-\frac{L}{2})' \Leftrightarrow \varkappa A e^{-\varkappa\frac{L}{2}} = ik\left(F e^{-ik\frac{L}{2}} - G e^{+ik\frac{L}{2}}\right)$ (iii)

- $\psi_E^{II}(\frac{L}{2})' = \psi_E^{III}(\frac{L}{2})' \Leftrightarrow ik\left(F e^{ik\frac{L}{2}} - G e^{-ik\frac{L}{2}}\right) = -\varkappa D e^{-\varkappa\frac{L}{2}}$ (IV)

* Um die Lösungen einfacher zu finden bzw. zu klassifizieren benutzen wir eine Symmetrie dieses Schwachs unter $\boxed{\text{Parität } P:}$ $x \to -x$

- Wegen $V(x) = V(-x)$ gilt für dieses Problem (und andere mit der selben Symmetrie):

$$E\psi_E(x) = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]}_{H}\psi_E(x) \overset{x\to -x}{\Rightarrow} \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x)\right]}_{\text{ebenfalls } \hat{=} H \text{ wegen Symmetrie}}\psi_E(-x) = E\psi_E(-x)$$

wobei $\psi_E(x)$ bereits eine Lösung von $H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$ ist,

$\Rightarrow$ zu jeder Lösung $\psi_E(x)$ mit Energie E gibt es bei symm. Potentialen immer eine Lösung $\psi_E(-x)$ zur selben Energie E!

- mit $\psi_E(\pm x)$ ist auch $\psi_E(+x) \pm \psi_E(-x)$ eine Lösung (Superpos.!)

$\exists$ 2 Fälle: 1) die Energie E ist nicht entartet, d.h. kommt genau $1\times$ vor $\Rightarrow$ $\psi_E(x) + \psi_E(x)$ oder $\psi_E(x) - \psi_E(-x)$ ist identisch 0 ($H0 = E0$ gilt immer, ist keine Eigenfunktion!)

2) die Energie E ist entartet, d.h. $\psi_E(x) \pm \psi_E(-x)$ beide $\neq 0$ und sogar linear unabhängig.

$\rightarrow$ In jedem Fall macht es Sinn, für symmetrische $V(x)$ die Lösungen mit gerader Parität $\psi(x) = +\psi(-x)$ und ungerader Parität $\psi(x) = -\psi(x)$ getrennt zu betrachten!

* Gerade (= symmetrische) Lösungen:

- $\psi_E^{I}(-x) = \psi_E^{III}(+x)$: $\forall x > \frac{L}{2}$ $\quad \psi_E^{I}(-x) = A e^{\varkappa(-x)} \overset{!}{=} D e^{-\varkappa x}$ $\forall x > \frac{L}{2}$

d.h. $\underline{A = D}$