$$-\int_{a^-}^{a^+} dx\, \psi_E''(x) \;-\; \int_{a^-}^{a^+} dx\, \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\,\delta(x-a)\,\psi_E(x) \;=\; k_0^2 \underbrace{\int_{-a}^{a^+} dx\, \psi_E(x)}_{\sim\, 2\varepsilon k_0^2 \psi_E(a) \xrightarrow{\varepsilon \to 0} 0}$$

Stammfkt von $\psi_E'(x)$ — δ nur um $a \neq 0$, wegen dasselbe wie $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x-a)\,\psi_E(x) = \psi_E(a)$ (wohldef. da ψ_E stetig bei a)

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \psi_E'(a^+) - \psi_E'(a^-) + \dfrac{2m\Omega}{\hbar^2}\,\psi_E(a) = 0 & \text{ii) Unstetigkeit der Ableitung} \\[2ex] \text{sowie } \underbrace{\psi_E(a^+)}_{\text{im Bereich II}} = \underbrace{\psi_E(a^-)}_{\text{im Bereich I}} & \text{i) Stetigkeit von } \psi_E(x) \text{ bei } x=a \end{array} \right.$$

i) $$e^{ika}\left[A e^{ik_0(a^+-a)} + B e^{-ik_0(a^+-a)}\right] = A e^{ik_0 a^-} + B e^{-ik_0 a^-}$$

$\varepsilon \to 0$ $$\boxed{e^{ika}[A+B] = A e^{ik_0 a} + B e^{-ik_0 a}}$$

ii) $$e^{ika}\left[ik_0 A e^{ik_0(a^+-a)} - ik_0 B e^{-ik_0(a^+-a)}\right] - \left(ik_0 A e^{ik_0 a^-} - ik_0 B e^{-ik_0 a^-}\right)$$

$$= -\frac{2m\Omega}{\hbar^2}\, e^{ika}[A+B]$$

(auf der rechten Seite ist egal ob wir I oder II wählen, wegen i))

$\varepsilon \to 0$ $$\boxed{ik_0\, e^{ika}[A-B] - ik_0\left(A e^{ik_0 a} - B e^{-ik_0 a}\right) = -\frac{2m\Omega}{\hbar^2}\, e^{ika}[A+B]}$$

Gleichungssystem in Matrixschreibweise:

$$\begin{pmatrix} e^{ik_0 a} - e^{ika} & e^{-ik_0 a} - e^{ika} \\[2ex] ik_0\left(e^{ik_0 a} - e^{ika}\right) - \dfrac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{ika} & -ik_0\left(e^{-ik_0 a} - e^{ika}\right) - \dfrac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\exists$ eine nicht-triviale Lösung für A und B $\Leftrightarrow$ det Matrix $= 0$,

also nach Regel von Sarrus det[X]

$$-ik_0\left(1-e^{ika+ik_0a}-e^{-ik_0a+ika}+e^{2ika}\right)-\frac{2m\Omega}{\hbar^2}\left(e^{ik_0a+ika}-e^{2ika}\right)$$

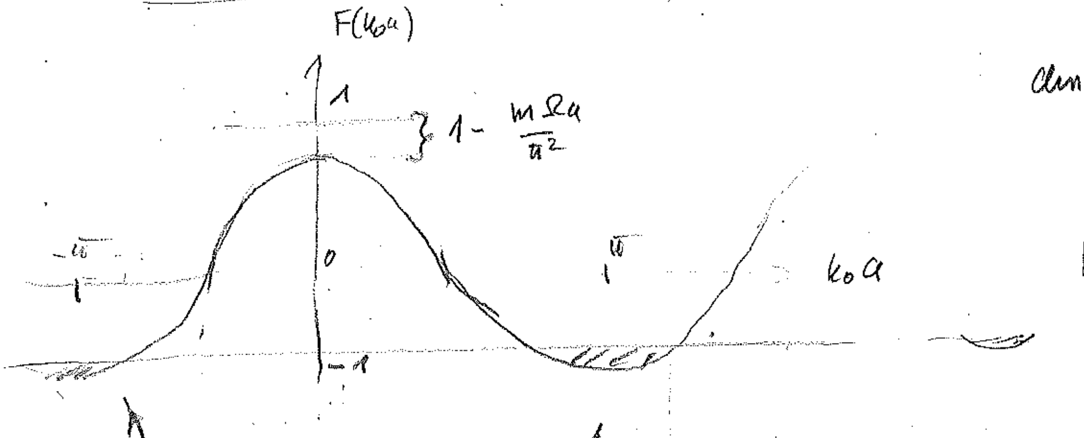
$$-ik_0\left(1-e^{-ik_0a+ika}-e^{ik_0a+ika}+e^{2ika}\right)+\frac{2m\Omega}{\hbar^2}\left(e^{-ik_0a+ika}-e^{2ika}\right)=0 \quad \Big|\cdot e^{-ika}$$

$$\Leftrightarrow\ -2ik_0\Big(\underbrace{e^{ika}+e^{-ika}}_{2\cos(ka)}\ \underbrace{-\ e^{ik_0a}-e^{-ik_0a}}_{-2\cos(k_0a)}\Big)-\frac{2m\Omega}{\hbar^2}\Big(\underbrace{e^{ik_0a}-e^{-ik_0a}}_{2i\sin(k_0a)}\Big)=0 \quad \Big|\frac{-1}{4ik_0}, \quad k_0>0$$

$$\Leftrightarrow\ \boxed{\cos(ka)=\cos(k_0a)-\frac{m\Omega a}{\hbar^2}\frac{\sin(k_0a)}{k_0a} \equiv F(k_0a)}$$

Auswerten a, rechte Seite als Fkt von k_0a $F(k_0a)$

Graphische Lösung für k (= const.)

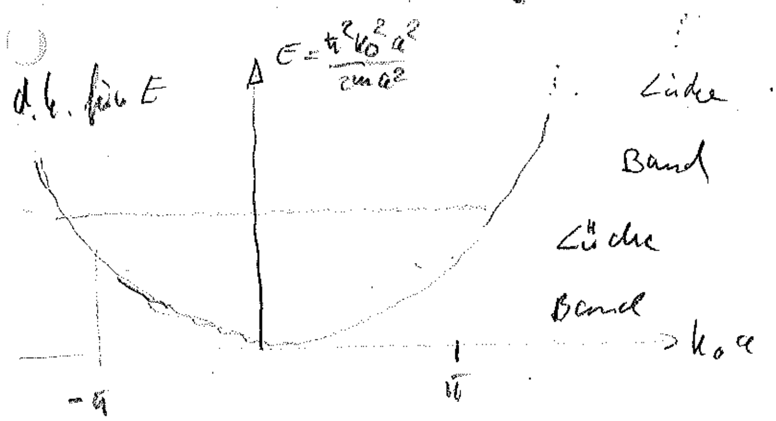


denn

$k_0=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

es gibt keine Lösung für $k\in\mathbb{R}$, da $|\cos(ka)|\le 1$

d.h. für E



Zusammenfassung: – Wir finden ein kontinuierliches Spektrum für $E>0$ und Bandstrukturen

→ physikalische Anwendungen in der kondensierten Materie: e^- auf Gitter + Pauli-Prinzip: $\nexists$ 2 e^- im gleichen Zustand:
Band gefüllt (mit e^- Zuständen) = Isolator, nicht gefüllt = Leiter, wenn die Lücke klein, d.h. durch relativ kleine Anregungen übersprungen = Halbleiter

3. Der allgemeine Formalismus der QM

Außer einigen grundlegenderen Überlegungen (Interpretation von $\psi, S, \vec{j}$, Zufalls- und Unabhängigkeit) haben wir uns bisher nur mit einfachen 1D Schrödingergl. und deren Lösungen beschäftigt, um einige grundlegende Phänomene der QM zu verstehen:

- Wahrscheinlichkeitsinterpretation, Aufenthalt in klass. verbotenen Bereichen
- Quantisierung der Energie,
- Transmission und Reflexion von Streuzuständen,
- Tunneleffekt

→ physikalisch realistische Probleme spielen sich i. A. in 3D ab und besitzen viel mehr Struktur, wie z.B. Bahndrehimpuls, Spin etc.

Um diesem Rechnung zu tragen, Symmetrien von Problemen besser zu erkennen und damit die Lösung zu vereinfachen benötigen wir einen allgemeinen und abstrakten Formalismus.

Mit den "Mathematischen Grundlagen der QM" (1932) legte J. v. Neumann schon sehr früh die erste math. rigorose Beschreibung der QM vor, so weit gehen wir aber nicht in die Tiefe.

3.1. Zustände, Observable und Erwartungswerte [Münster Kapitel 4.1-4.4, Fließbach V. 30]

- Physikalische Zustände (Teilchen/Wellen wie e^-, α-Teilchen, Atomkerne etc.) werden als Vektoren $|\psi\rangle$ (Dirac-Notation, "Ket"-Vektor) in einem komplexen Vektorraum V dargestellt. V mit Körper $K=\mathbb{C}$ erfüllt Vektorraumaxiome bzgl. Addition und skalarer Multiplikation, insbes. ist V linear: $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in V$, $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle \in V$$

- zu jedem $|\psi\rangle \in V$ gibt es einen konjugierten Vektor $\langle\psi| \in V^*$ (bra-Vektor) im dualen Vektorraum.
- auf V gibt es ein komplexwertiges Skalarprodukt das wir folgendermaßen schreiben $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in V$

$$\Rightarrow \langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C} \quad \text{(bra-ket)}$$

$\left(\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = |\psi\rangle \in \mathbb{C}^3 \Rightarrow \langle\psi| = \left(\ \right)^\dagger = (x^*, y^*, z^*) \right)$

$\langle\psi|\psi\rangle = |x|^2 + |y|^2 + |z|^2$

mit folgenden Eigenschaften

$$* \quad \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* \quad (\text{i.A.} \neq \langle\psi_1|\psi_2\rangle^*)$$

$*$ linear im 2. Argument:

$$\langle\psi_1|\underbrace{\alpha\psi_2 + \beta\psi_3}_{\in V}\rangle = \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle$$

$\Rightarrow$ auch linear im 1. Argument

$$\langle\alpha\psi_2 + \beta\psi_3|\psi_1\rangle = (\langle\psi_1|\alpha\psi_2 + \beta\psi_3\rangle)^* = (\alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle)^*$$

$$= \alpha^*\langle\psi_2|\psi_1\rangle + \beta^*\langle\psi_3|\psi_1\rangle$$

$*$ wir können eine positiv definite Norm $\|\psi\|$ eines $|\psi\rangle \in V$ definieren durch

$$\|\psi\|^2 = \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{(=\langle\psi|\psi\rangle^*)} \geq 0$$

insbesondere gilt $*$ $\quad \|\psi\| = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = |0\rangle$, der Nullvektor

(= neutrales Element bzgl. Addition auf V)

- Wenn $\forall |\psi\rangle \in V$ gilt daß $\|\psi\| < \infty$ und V vollständig ist (Folgen konvergieren in V) ist V ein Hilbertraum. Diese zeichnen sich u.A. durch die Existenz einer Basis aus. Im Folgenden werden wir oft endlich oder abzählbar dimensionale V betrachten.
- Wenn $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ und $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \neq 0$ heißen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ orthogonal zueinander.

* Wie wir bereits in Bsp. gesehen haben gibt es auch nicht normierbare Streuzustände, die physikalisch wichtig sind!

$\Rightarrow$ wir müßten diese eigentlich normierbar machen, z.B. durch ein endliches physikalisches Volumen, oder durch einen Konvergenz erzeugenden Faktor $e^{ikx} \to e^{ikx - \varepsilon|x|}$

* Wir postulieren, daß $|\psi\rangle$ und $\alpha|\psi\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ konstant dieselbe physikalische Info enthalten, d.h. wir beschränken uns auf Zustände mit $\|\psi\| = 1$.

• Physikalische Größen (Observablen!) (Energie, Impuls, Ort, ...) werden durch lineare Abbildung $\hat{A}: V \to V$ dargestellt, diese heißen auch Operatoren $\hat{A}$ ($\mathbb{R}^3$: 3x3 Matrizen bilden $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ ab)

d.h. es gilt $\boxed{\hat{A}[\underbrace{\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle}_{\in V}] = \alpha\hat{A}|\psi_1\rangle + \beta\hat{A}|\psi_2\rangle} \in V$

Im Folgenden werden wir oft versuchen, Eigenzustände $|a\rangle$ mit Eigenwert a zum Operator $\hat{A}$ zu finden: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$,

z.B. s. S.14 $\boxed{\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle,}$ mit $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})$ Hamiltonop.

mit Eigenwerten E, der Energie. Diese entsprechen den Meßwerten der phys. Größe (des Operators), diese sollte hier reel sein $E = E^*$

* Wie bereits gesehen (z.B. S.12) gibt es verschiedene Darstellungen eines physikalischen Zustandes, z.B. $\psi(\vec{r})$ in Ortsdarstellung, oder seine Fouriertrafo