



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als
Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung,
Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

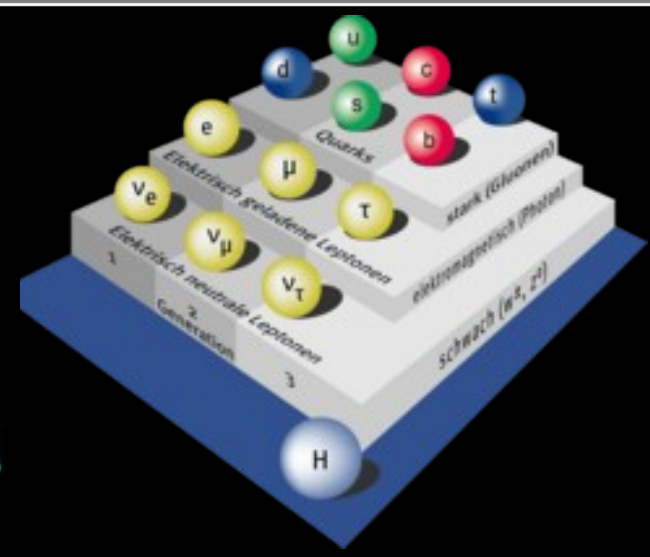
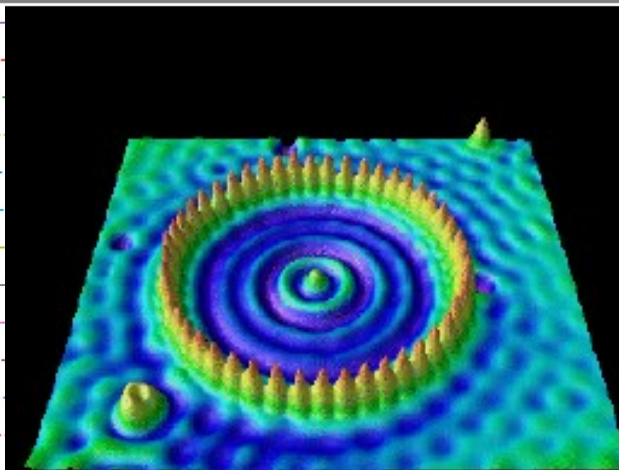
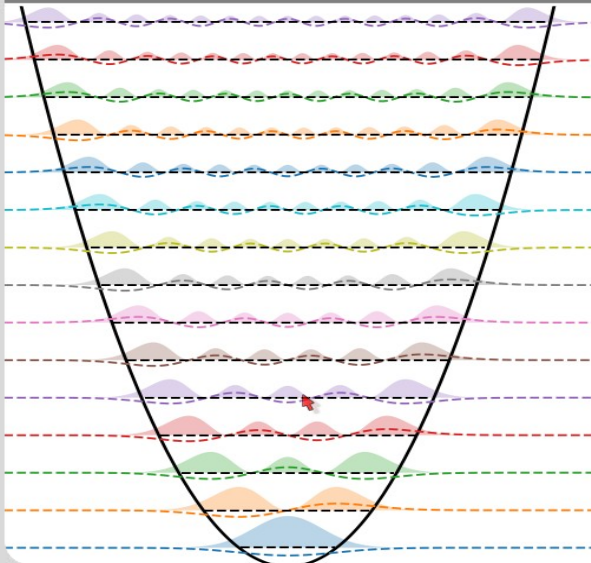
Vorlesung **Moderne Physik (L)**

V08: **Anwendungen der Schrödingergleichung**

Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



Schrödingergleichung

- Schrödingergleichung:
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \underbrace{V(\vec{x})}_{\text{Potential}} \right\} \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t)$$
- Wahrscheinlichkeit:
$$P(\vec{x}, t) = \underbrace{|\Psi(\vec{x}, t)|^2}_{=\Psi^* \cdot \Psi} \text{ mit } \int \underbrace{|\Psi(\vec{x}, t)|^2}_{=\Psi^* \cdot \Psi} dV = 1$$
- Schrödinger-Gleichung mit Impulsoperator:
$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right\} \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$
 - $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$: „Impulsoperator“

- Weitere Operatoren:

- $\mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

- $\mathbf{x} = x$

- $\mathbf{V} = V(x)$

- $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$ „Hamilton-Operator“

- Kenntnis der Wellenfunktion eines Systems erlaubt die Berechnung von Erwartungswerten¹ physikalischer Observablen aus dem zugehörigen Operator:

$$\langle o \rangle = \int \Psi^* O \Psi dV$$

- übliche Schreibweise: $\langle o \rangle = \langle \Psi | \mathbf{O} | \Psi \rangle$
 - auch die Standardabweichung σ , oder V , die Varianz² lassen sich so berechnen:
 $\sigma_O^2 = \langle (\mathbf{O} - \langle \mathbf{O} \rangle)^2 \rangle = \langle \mathbf{O}^2 \rangle - \langle \mathbf{O} \rangle^2 = \langle \Psi | \mathbf{O}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \mathbf{O} | \Psi \rangle^2$
 - Falls Ψ eine Eigenfunktion des Operators $\mathbf{O}$ ist, also gilt $\mathbf{O}\Psi = o\Psi$ mit dem reellen Eigenwert o , so verschwindet die Varianz, d.h. die Observable ist scharf bestimmt.

- Stationäre Schrödingergleichung:

$$\underbrace{\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right\}}_{\mathbf{H}} \Psi(\vec{x}) = E \cdot \Psi(\vec{x})$$

- $\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) \cdot e^{-i\omega t}$

- $|\Psi(\vec{x})|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte

- $P(x \in [x_0, x_0 + \Delta x]) = \int_{x_0}^{x_0 + \Delta x} |\Psi(x)|^2 dx$ (1-dim.)

- $P(\vec{x} \in \Delta V) = \int_{\Delta V} |\Psi(\vec{x})|^2 dV$ (3-dim.)

- Einfache Systeme mit der stationären Schrödingergleichung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = (E - V) \Psi(x) \cdot \frac{-2m}{\hbar^2}$$

- $E - V > 0$: oszillierende Lösung
- $E - V < 0$: exponentieller Abfall

- $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2$

- $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, n = 1, 2, 3, \dots$

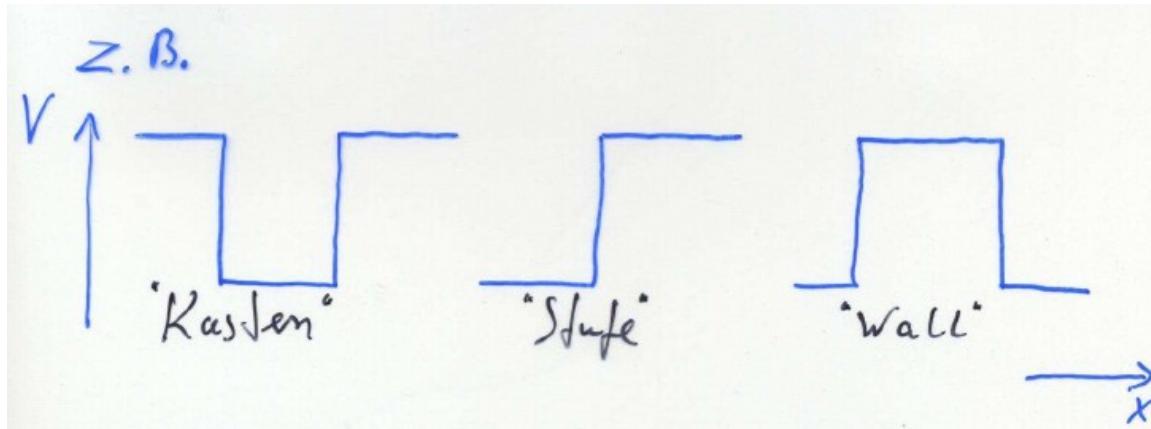
- Potential-Kasten in 3 Dimensionen:

$$\Psi(\vec{x}) = A \cdot \sin(k_x \cdot x) \cdot \sin(k_y \cdot y) \cdot \sin(k_z \cdot z)$$

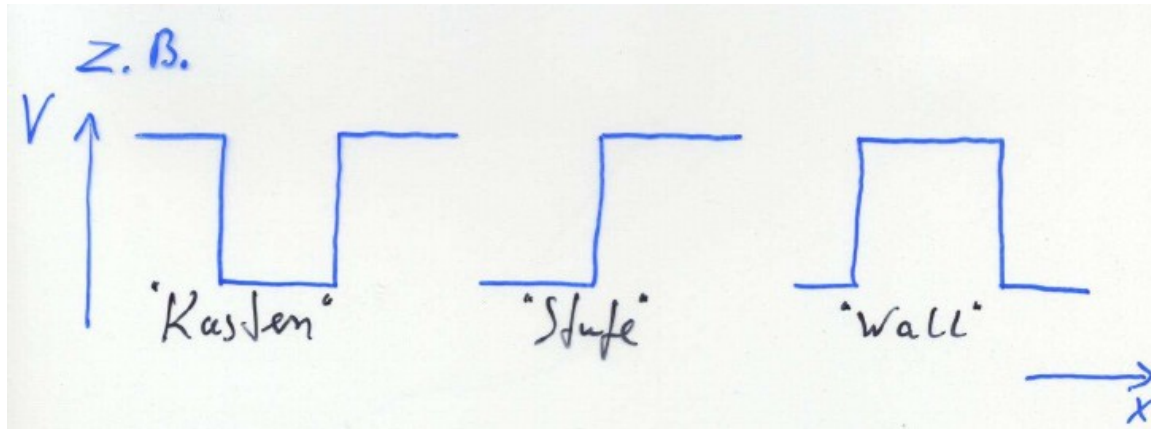
- $k_{x,y,z} = \frac{n_{x,y,z} \cdot \pi}{l_{x,y,z}}, n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$

- Eine Quantenzahl pro Raumdimension

- Zustände mit unterschiedlichen Quantenzahlen, aber gleicher Energie nennt man **entartete Zustände**.



$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (V - E)\psi(x)$$



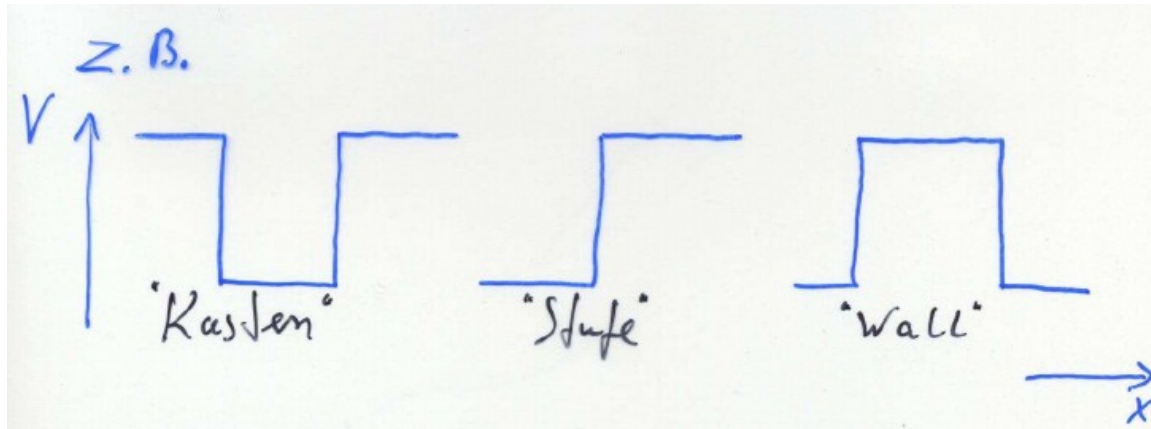
$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (V - E) \psi(x)$$

$(V-E) > 0$: exponentiell gedämpft

$$\text{Ansatz: } A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

$(V-E) < 0$: oszillierende Lösung

$$\text{Ansatz: } A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$



$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (V - E) \psi(x)$$

$(V-E) > 0$: exponentiell gedämpft

$$\text{Ansatz: } A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

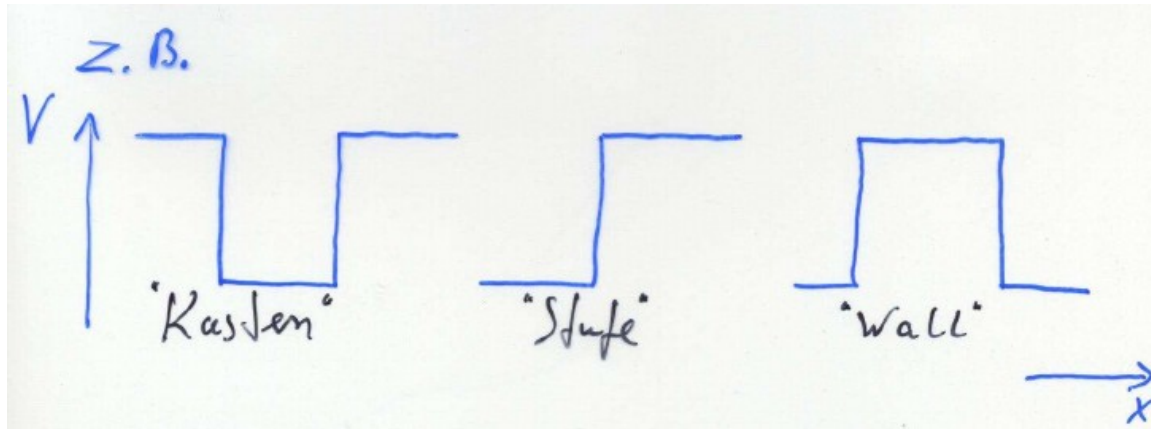
$(V-E) < 0$: oszillierende Lösung

$$\text{Ansatz: } A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

Randbedingungen:

$$\int \psi^* \psi = 1$$

ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ stetig an Grenzen



$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (V - E) \psi(x)$$

$(V-E) > 0$: exponentiell gedämpft

Ansatz: $A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$

$(V-E) < 0$: oszillierende Lösung

Ansatz: $A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$

Randbedingungen:

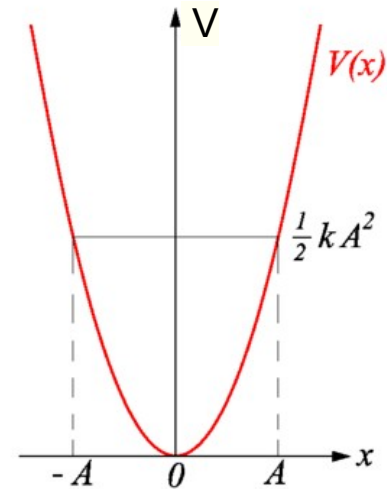
$$\int \psi^* \psi = 1$$

ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ stetig an Grenzen

→ Bedingungen an Koeffizienten (Gleichungssystem)

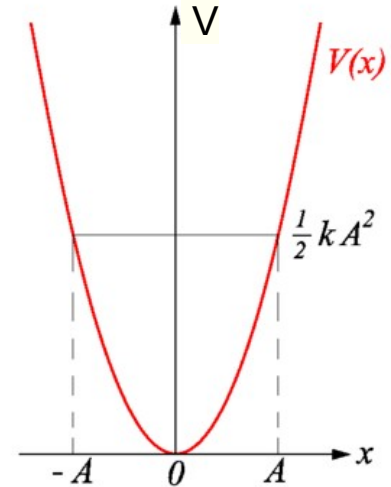
- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) **Anwendungen der Schrödingergleichung**
- 7) Das Wasserstoff-Atom
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände



- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände

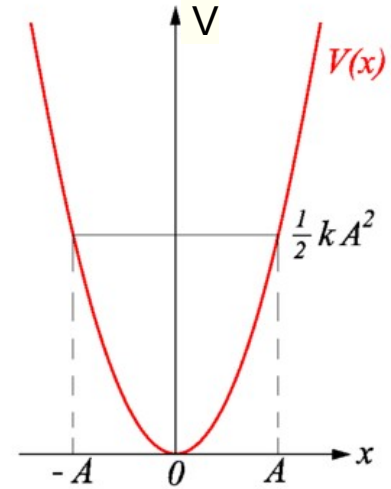
Hooke'sches Gesetz: $F = -D x$



- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände

Hooke'sches Gesetz: $F = -D x$

Potential:
$$V(x) = \int_x^0 -Dx \, dx = \frac{1}{2} D x^2$$

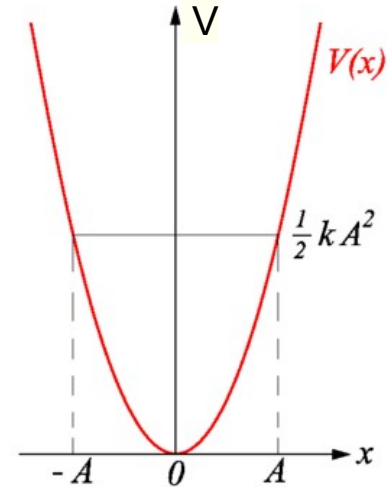


- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände

Hooke'sches Gesetz: $F = -D x$

Potential:
$$V(x) = \int_x^0 -Dx \, dx = \frac{1}{2} D x^2$$

Klass. Lösung:
harmonische Schwingung mit $\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$



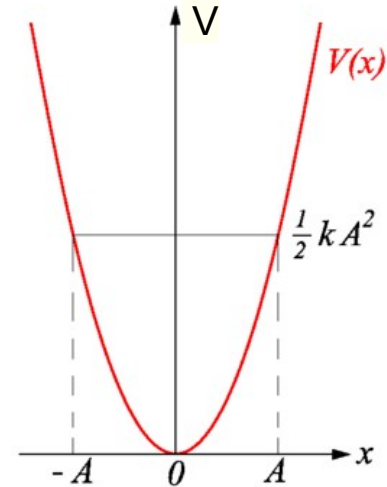
- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände

Hooke'sches Gesetz: $F = -D x$

Potential:
$$V(x) = \int_x^0 -Dx \, dx = \frac{1}{2} D x^2$$

Klass. Lösung:
harmonische Schwingung mit $\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$

Klass. Gesamtenergie:
$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$



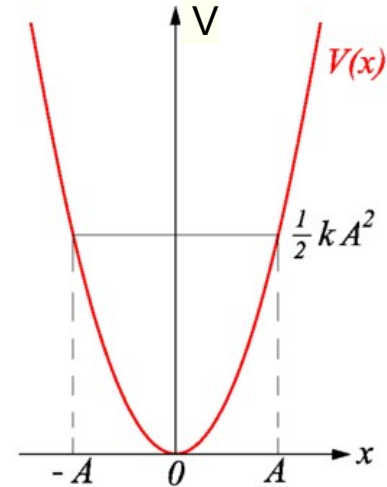
- in der **klassischen Mechanik**: Prototyp für Schwingungen
- auch in der **Quantenphysik** äußerst wichtig zur (näherungsweisen) Beschreibung gebundener Zustände

Hooke'sches Gesetz: $F = -D x$

Potential:
$$V(x) = \int_x^0 -Dx \, dx = \frac{1}{2} D x^2$$

Klass. Lösung:
harmonische Schwingung mit $\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$

Klass. Gesamtenergie:
$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$



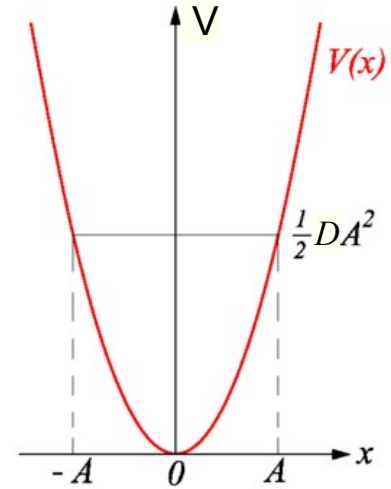
→ **Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators** (für Schrödingergleichung)

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{\mathbf{x}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

$$\hat{\mathbf{H}}\psi(x) = E\psi(x)$$

Variablentransformation zur Vereinfachung:

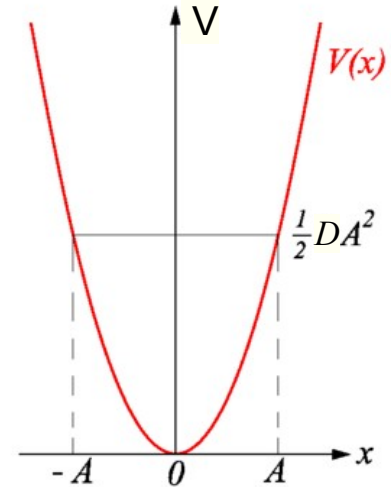
$$y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$



Variablentransformation zur Vereinfachung:

$$y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} y^2$$

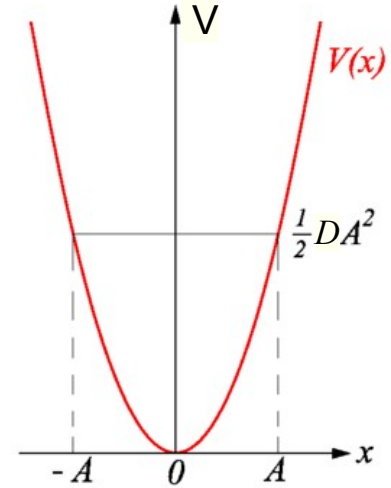


Variablentransformation zur Vereinfachung:

$$y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} y^2$$

$$\rightarrow \text{S-Gl.:} \quad \left(-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar\omega}{2} \right) \psi(y) = E\psi(y)$$



Variablentransformation zur Vereinfachung:

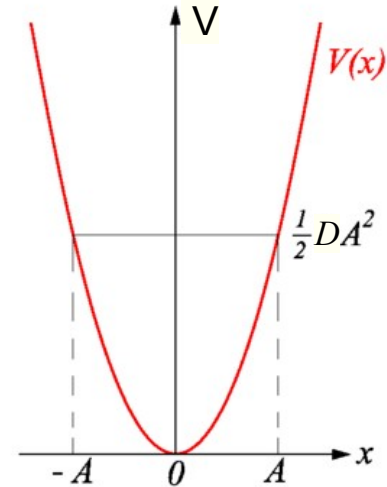
$$y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} y^2$$

$$\rightarrow \text{S-Gl.:} \quad \left(-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar\omega}{2} y^2 \right) \psi(y) = E\psi(y)$$

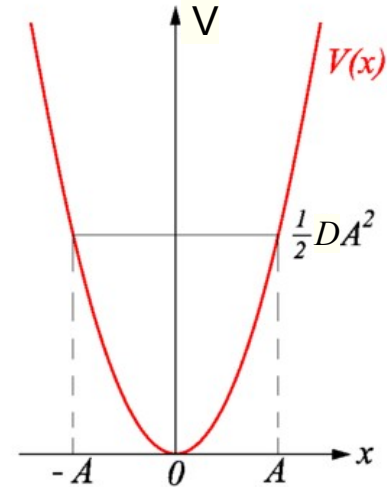
$$\text{mit } C := \frac{2E}{\hbar\omega} \rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + (y^2 - C) \right) \psi(y) = 0$$

$$\Leftrightarrow \underline{\psi'' + (C - y^2)\psi = 0}$$



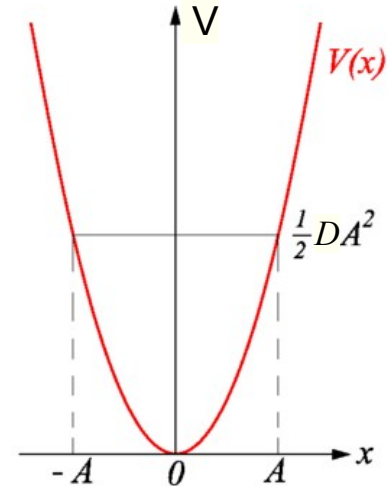
Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$



Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$
$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

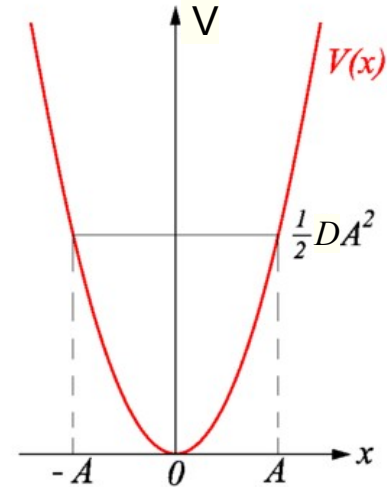


Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$



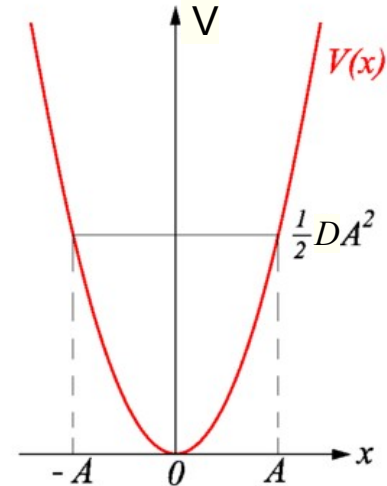
Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$



Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

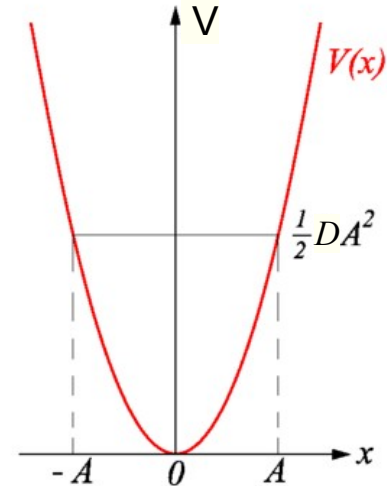
$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$

2. Ansatz: $\psi(y) = A(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$



Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

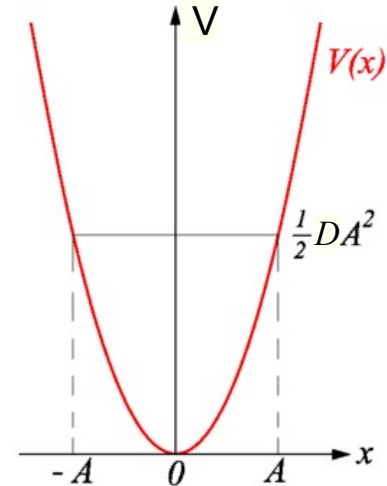
$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$

2. Ansatz: $\psi(y) = A(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$$\psi' = A' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - Ay \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$



Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

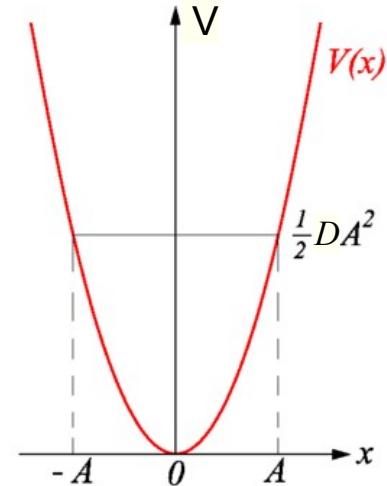
$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$

2. Ansatz: $\psi(y) = A(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$$\psi' = A' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - Ay \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \psi'' = & A'' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - A'y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - A'y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \\ & - A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + Ay^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \end{aligned}$$



Lösung der Differentialgleichung mit 1. Ansatz:

$$\psi(y) = A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi' = -y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right);$$

$$\psi'' = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \psi'' = \psi(y^2 - 1) \quad \text{Ansatz löst DGL für } C=1$$

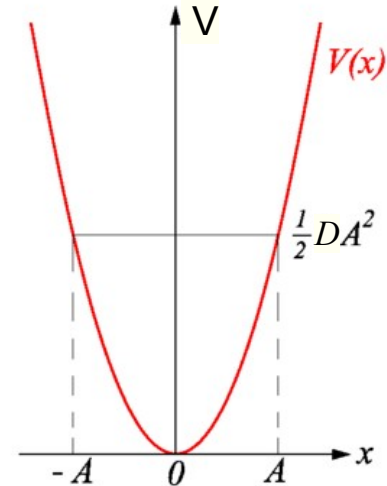
2. Ansatz: $\psi(y) = A(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$$\psi' = A' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - Ay \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$\psi'' = A'' \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - A'y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) - A'y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

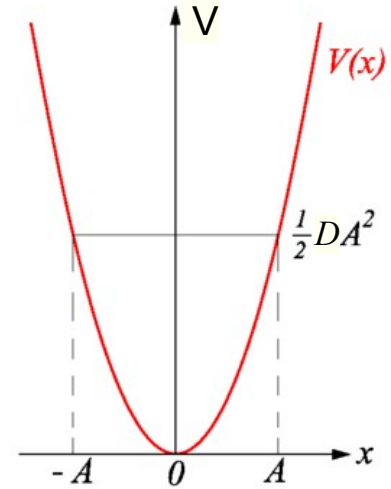
$$-A \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) + Ay^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

$$= (A'' - 2yA' + A(y^2 - 1)) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$



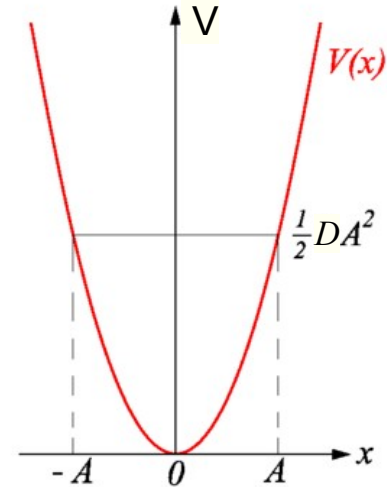
$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion



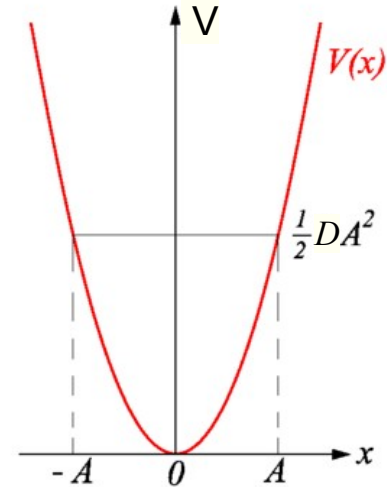
$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,



$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

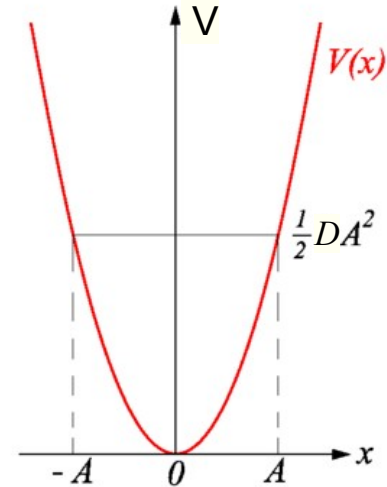


$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$H_n(y) = \sum_{i=1}^n a_i y^i$$



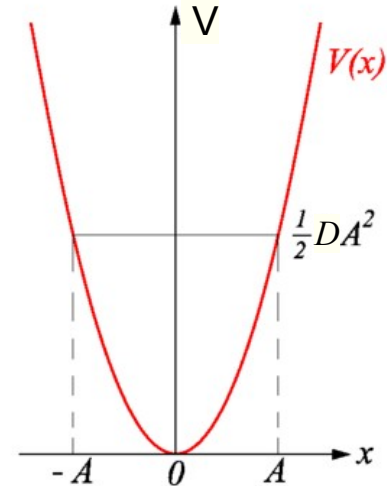
$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$H_n(y) = \sum_{i=1}^n a_i y^i$$

$$H'_n = \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1) a_{i+1} y^i$$



$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

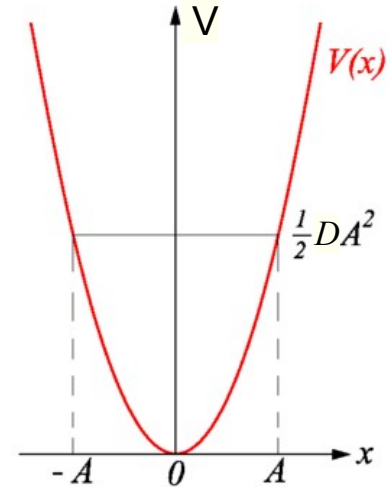
neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$H_n(y) = \sum_{i=1}^n a_i y^i$$

$$H'_n = \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1) a_{i+1} y^i$$

$$H''_n = \sum_{j=2}^n j(j-2) a_j y^{j-2} = \sum_{i=0}^{n-2} (i+1)(i+2) a_{i+2} y^i$$



$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

Lösung durch Potenzreihenansatz:

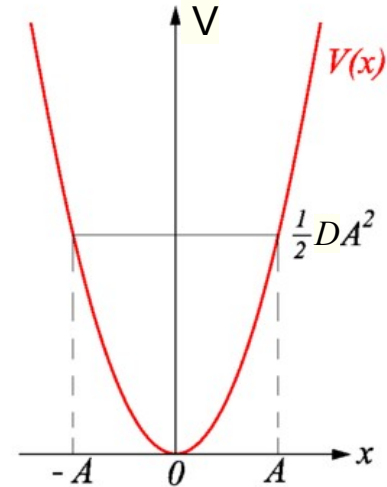
$$H_n(y) = \sum_{i=1}^n a_i y^i$$

$$H'_n = \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1) a_{i+1} y^i$$

$$H''_n = \sum_{j=2}^n j(j-2) a_j y^{j-2} = \sum_{i=0}^{n-2} (i+1)(i+2) a_{i+2} y^i$$

Einsetzen in Hermite'sche DGL:

$$\sum_{i=0}^{n-2} (i+1)(i+2) a_{i+2} y^i - 2y \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} + (C-1) \sum_{i=0}^n a_i y^i = 0$$



$$\Rightarrow A'' - 2yA' + (C - 1)A = 0$$

neue DGL für Koeffizientenfunktion: „Hermite'sche DGL“,
wird gelöst durch die **Hermite'schen Polynome** H_n

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$H_n(y) = \sum_{i=0}^n a_i y^i$$

$$H'_n = \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1) a_{i+1} y^i$$

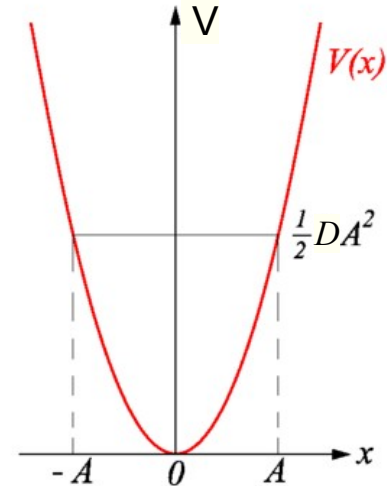
$$H''_n = \sum_{j=2}^n j(j-2) a_j y^{j-2} = \sum_{i=0}^{n-2} (i+1)(i+2) a_{i+2} y^i$$

Einsetzen in Hermite'sche DGL:

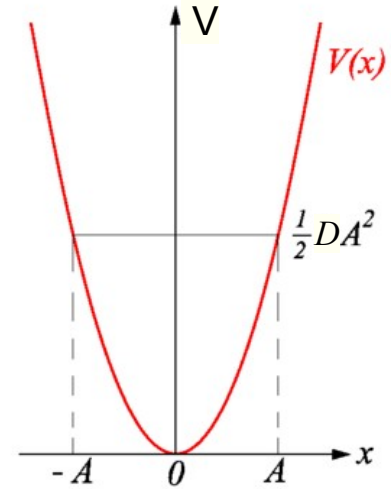
$$\sum_{i=0}^{n-2} (i+1)(i+2) a_{i+2} y^i - 2y \sum_{j=1}^n j a_j y^{j-1} + (C-1) \sum_{i=0}^n a_i y^i = 0$$

$$\downarrow$$

$$-2 \sum_{j=1}^n j a_j y^j +$$

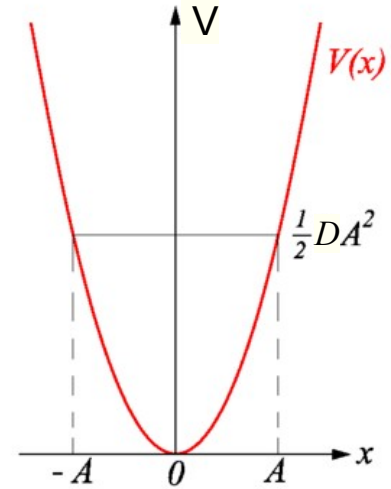


Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :



Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

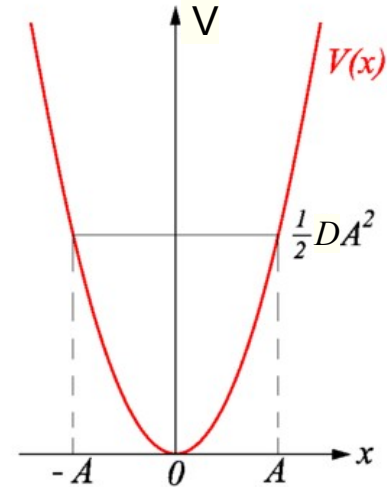


Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$



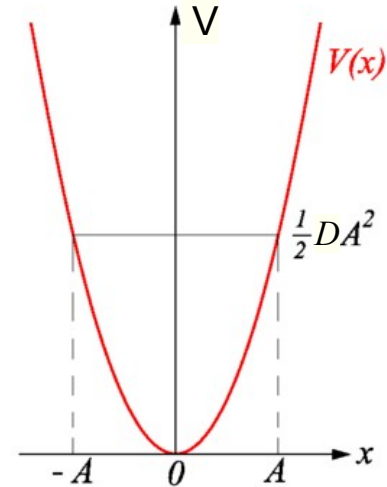
Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$\rightarrow$ Abbruch bei $a_{n+2}=0$



Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

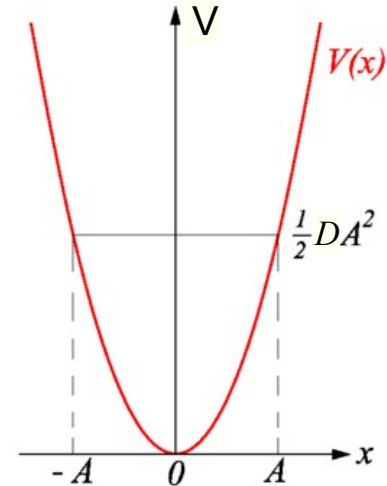
$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$\rightarrow$ Abbruch bei $a_{n+2}=0$

$$\rightarrow 2n - (c - 1)a_n = 0 \Leftrightarrow \underline{C = 2n + 1}$$



Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

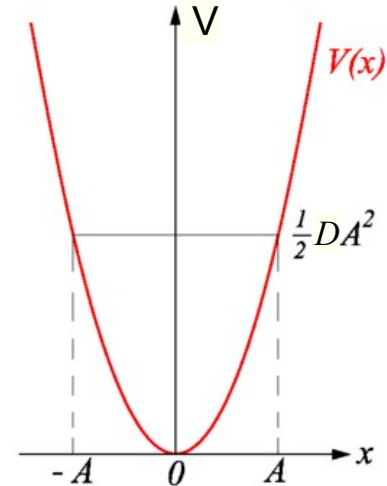
Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$

$\rightarrow$ Abbruch bei $a_{n+2}=0$

$$\rightarrow 2n - (c - 1)a_n = 0 \Leftrightarrow \underline{C = 2n + 1}$$

$$\text{Einsetzen : } C = \frac{2E}{\hbar\omega} \Rightarrow \underline{E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$



Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

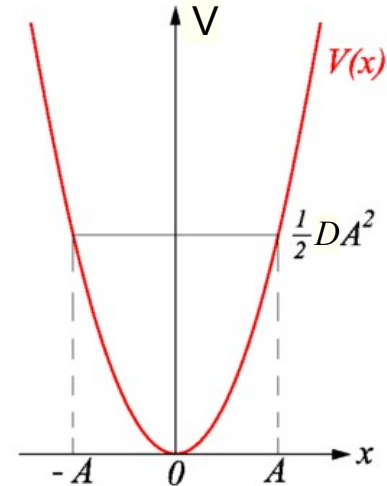
Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$

$\rightarrow$ Abbruch bei $a_{n+2}=0$

$$\rightarrow 2n - (c - 1)a_n = 0 \Leftrightarrow \underline{C = 2n + 1}$$

Einsetzen : $C = \frac{2E}{\hbar\omega} \Rightarrow \underline{E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega}$



Resultat:

Zur Lösung $\psi_n(y) = H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$ **gehört**
die Energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

Vergleich der Koeffizienten für gleiche $i \rightarrow$ Rekursionsformel :

$$(i + 2)(i + 1)a_{i+2} = (2i - (C - 1))a_i$$

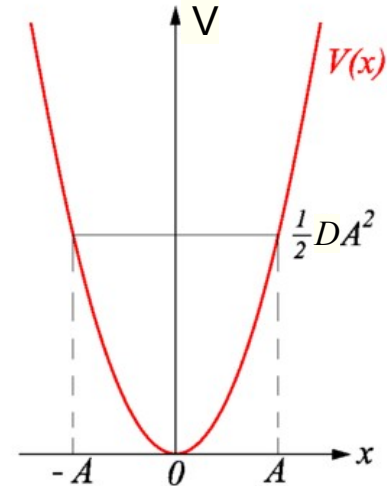
Die Potenzreihe muss für alle y endlich bleiben

(wegen Normierbarkeit von Ψ): $\psi_n(y) = H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$

$\rightarrow$ Abbruch bei $a_{n+2}=0$

$$\rightarrow 2n - (c - 1)a_n = 0 \Leftrightarrow \underline{C = 2n + 1}$$

$$\text{Einsetzen : } C = \frac{2E}{\hbar\omega} \Rightarrow \underline{E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega}$$



Resultat:

Zur Lösung $\psi_n(y) = H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$ **gehört**
die Energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

Nullpunktenergie $\frac{1}{2}\hbar\omega$

Ohne Rechnung:

Hermite-Plynome, mit $\int |\psi_n(y)|^2 = 1$

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_3(y) = 4y^2 - 2$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$

...

Ohne Rechnung:

Hermite-Plynome, mit $\int |\psi_n(y)|^2 = 1$

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_3(y) = 4y^2 - 2$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$

...

$$\Rightarrow \psi_n(x) = H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

Ohne Rechnung:

Hermite-Plynome, mit $\int |\psi_n(y)|^2 = 1$

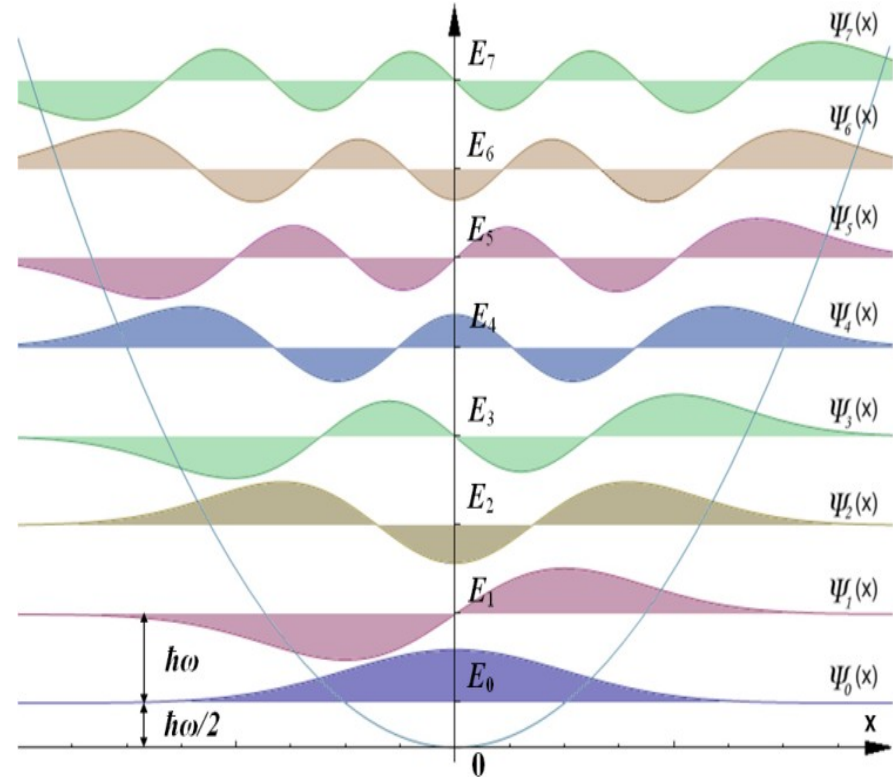
$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_3(y) = 4y^2 - 2$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$

...



wikipedia: Harmonischer_Oszillator

$$\Rightarrow \psi_n(x) = H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

Pause

und Zeit für Fragen ?

- numerische Lösung

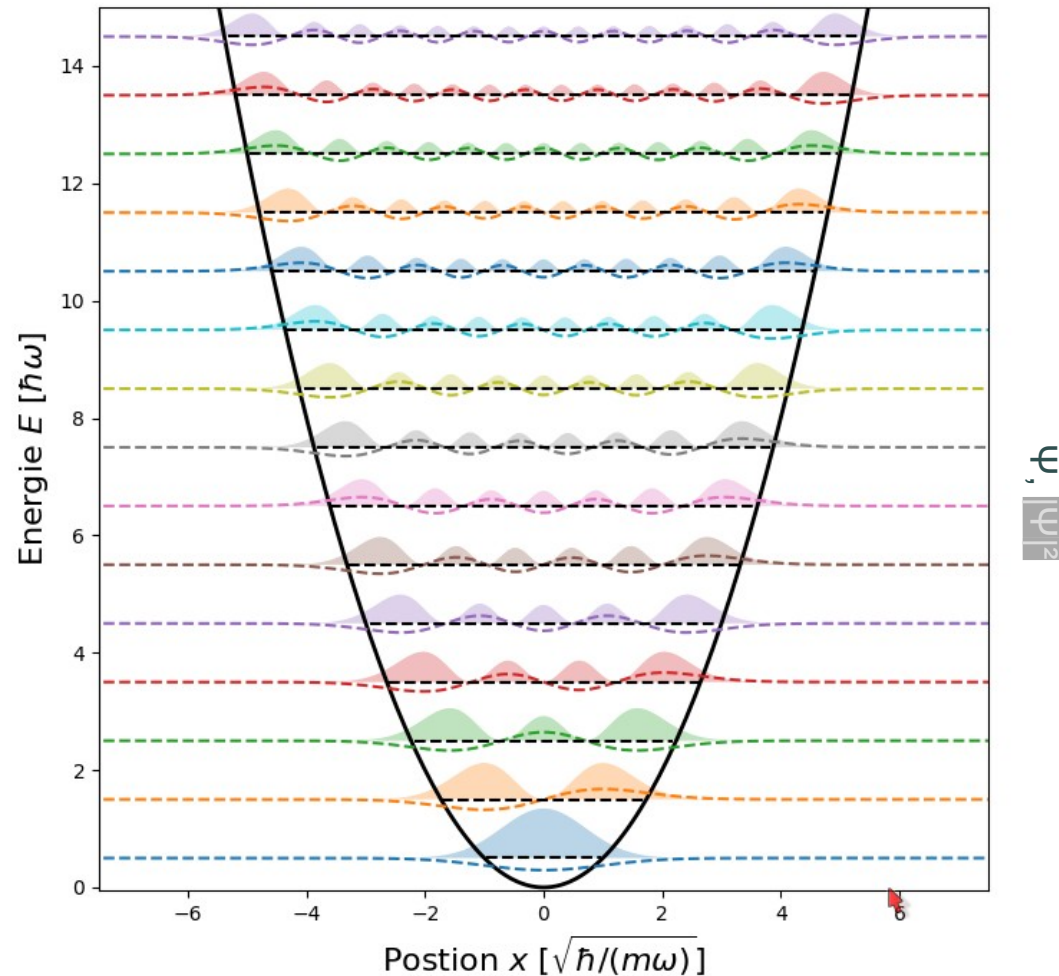
Numerische Lösung mit
Ableitungsmatrix und Potential
an Stützstellen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{D}_2) + m\omega(\mathbf{x}^2) \right) (\psi) = E(\psi)$$

- numerische Lösung

Numerische Lösung mit
Ableitungsmatrix und Potential
an Stützstellen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{D}_2) + m\omega(\mathbf{x}^2) \right) (\psi) = E(\psi)$$



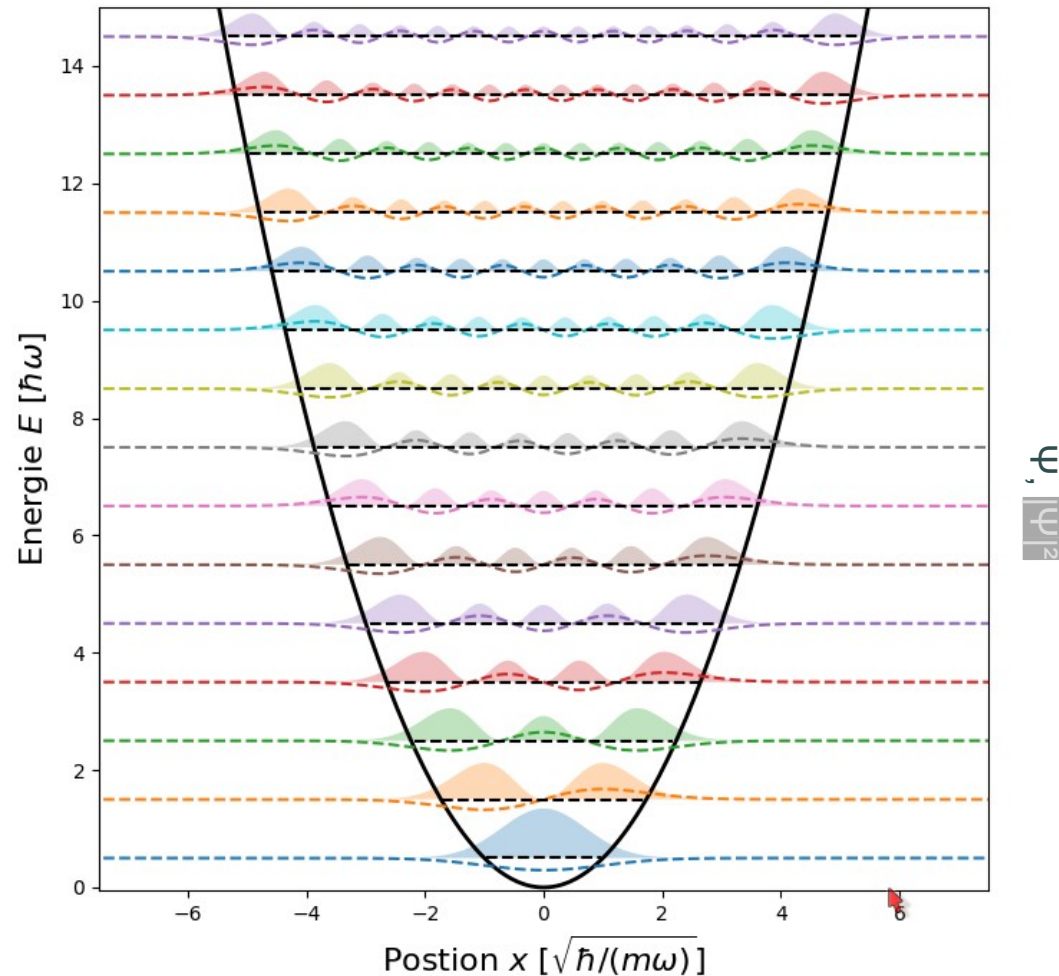
- numerische Lösung

Numerische Lösung mit
Ableitungsmatrix und Potential
an Stützstellen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{D}_2) + m\omega(\mathbf{x}^2) \right) (\psi) = E(\psi)$$

Zur Methode s. Erklärung am Beispiel
des endlichen Potentialtopfs:

Bestimmung der Eigenwerte und
Eigenvektoren einer Matrix mit
Methoden der linearen Algebra



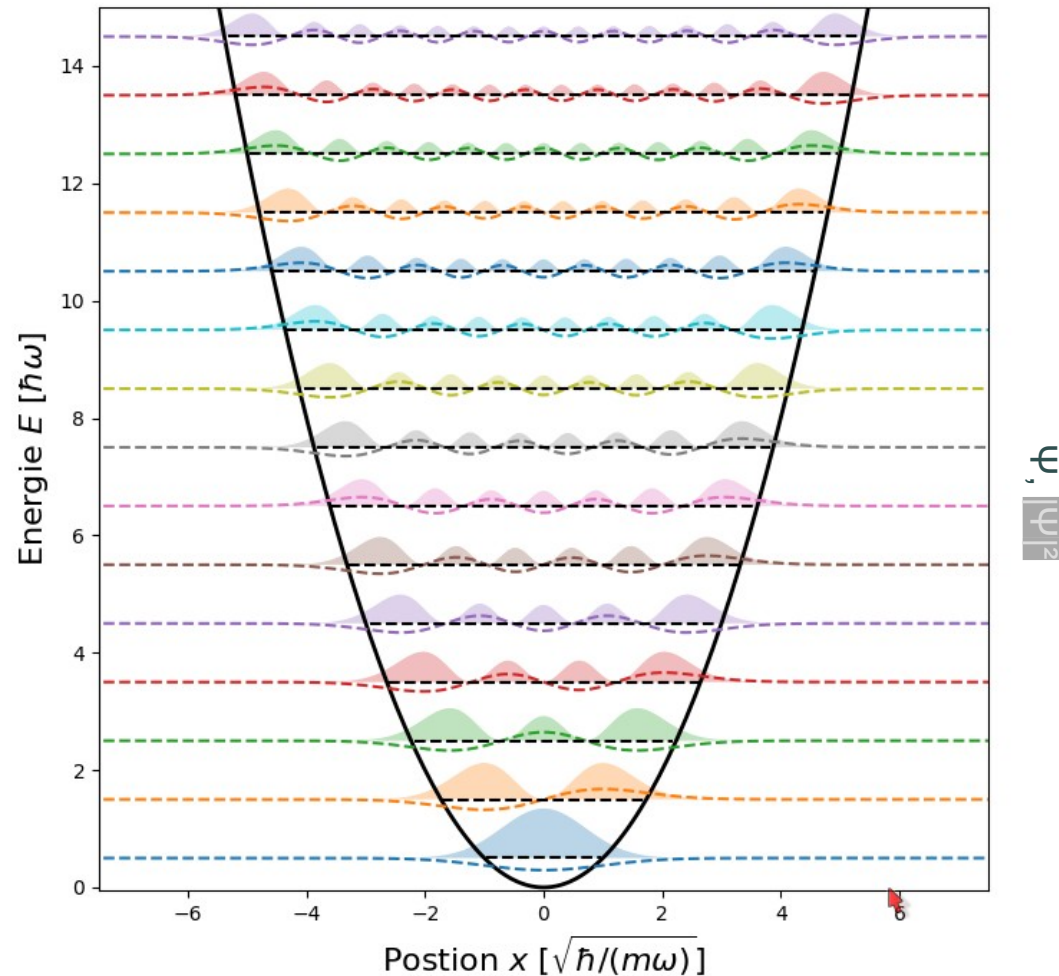
- numerische Lösung

Numerische Lösung mit
Ableitungsmatrix und Potential
an Stützstellen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{D}_2) + m\omega(\mathbf{x}^2) \right) (\psi) = E(\psi)$$

Zur Methode s. Erklärung am Beispiel
des endlichen Potentialtopfs:

Bestimmung der Eigenwerte und
Eigenvektoren einer Matrix mit
Methoden der linearen Algebra



$E, |\psi|^2$

Anmerkung: Auffällig ist, dass für große n die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Rand, also an den klassischen Umkehrpunkten, größer wird !

- numerische Lösung (2)

Alternativ wird die Differentialgleichung zweiter Ordnung numerisch gelöst

Vorgehensweise:

- Bestimmung eines Werts für E , der die Randbedingung erfüllt, durch Iteration (z.B. mit Bisektion oder Newton-Verfahren)

- numerische Lösung (2)

Alternativ wird die Differentialgleichung zweiter Ordnung numerisch gelöst

Vorgehensweise:

- Umwandlung in ein System von Dgl. 1. Ordnung durch
Einführen einer weiteren Funktion $\phi = \psi'$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \rightarrow \begin{cases} \psi' = \phi \\ \phi' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \end{cases}$$

- Bestimmung eines Werts für E , der die Randbedingung erfüllt, durch Iteration
(z.B. mit Bisektion oder Newton-Verfahren)

- numerische Lösung (2)

Alternativ wird die Differentialgleichung zweiter Ordnung numerisch gelöst

Vorgehensweise:

- Umwandlung in ein System von Dgl. 1. Ordnung durch Einführen einer weiteren Funktion $\phi = \psi'$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \rightarrow \begin{cases} \psi' = \phi \\ \phi' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \end{cases}$$

- Wahl von Anfangsbedingungen am linken Rand

$$\psi(x_0) = \psi_0$$

$$\phi(x_0) = \psi'(x_0) = \phi_0 \quad \text{d.h. Wahl eines Start-Werts für } E$$

- Bestimmung eines Werts für E , der die Randbedingung erfüllt, durch Iteration (z.B. mit Bisektion oder Newton-Verfahren)

- numerische Lösung (2)

Alternativ wird die Differentialgleichung zweiter Ordnung numerisch gelöst

Vorgehensweise:

- Umwandlung in ein System von Dgl. 1. Ordnung durch Einführen einer weiteren Funktion $\phi = \psi'$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \rightarrow \begin{cases} \psi' = \phi \\ \phi' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \end{cases}$$

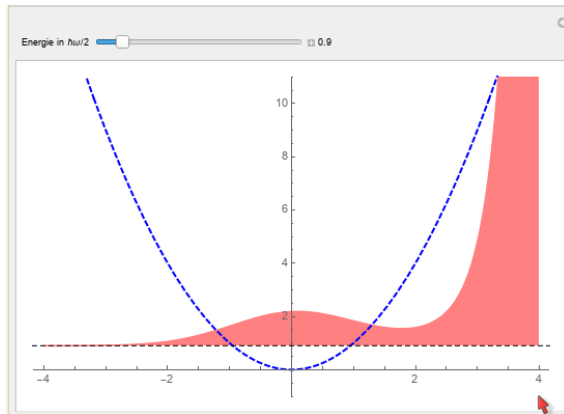
- Wahl von Anfangsbedingungen am linken Rand

$$\psi(x_0) = \psi_0$$

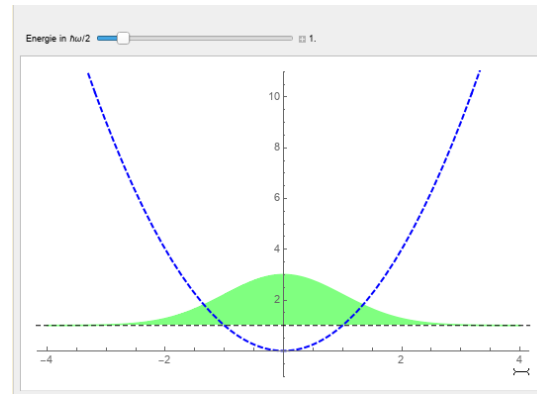
$$\phi(x_0) = \psi'(x_0) = \phi_0 \quad \text{d.h. Wahl eines Start-Werts für } E$$

- Lösung dieses Anfangswertproblems mit Standard-Verfahren (z.B. Runge-Kutta) $\rightarrow$ Wert für $\psi(x_r)$ am rechten Rand.
- Bestimmung eines Werts für E , der die Randbedingung erfüllt, durch Iteration (z.B. mit Bisektion oder Newton-Verfahren)

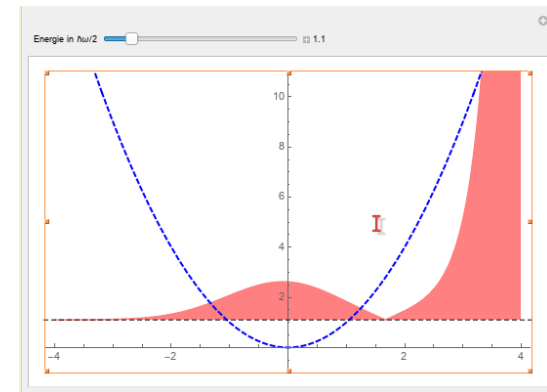
Didaktisch motiviertes Beispiel: Einstellung der Energie über Schieberegler



Energie zu niedrig,
Wellenfunktion divergiert



Energie passt,
Randbedingung erfüllt



Energie zu hoch,
Wellenfunktion divergiert

Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

- ? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

während einer halben Periodendauer T : $dw = \frac{2}{T} dt$

Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

während einer halben Periodendauer T : $dw = \frac{2}{T} dt$

$$\text{mit } dt = dx \frac{1}{\frac{dx}{dt}}$$

Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

während einer halben Periodendauer T : $dw = \frac{2}{T} dt$

$$\text{mit } dt = dx \frac{1}{\frac{dx}{dt}}$$

$$\rightarrow dw \propto \frac{1}{v(x)T} dx$$

$$\Rightarrow w(x) \propto \frac{1}{v(x)T}$$

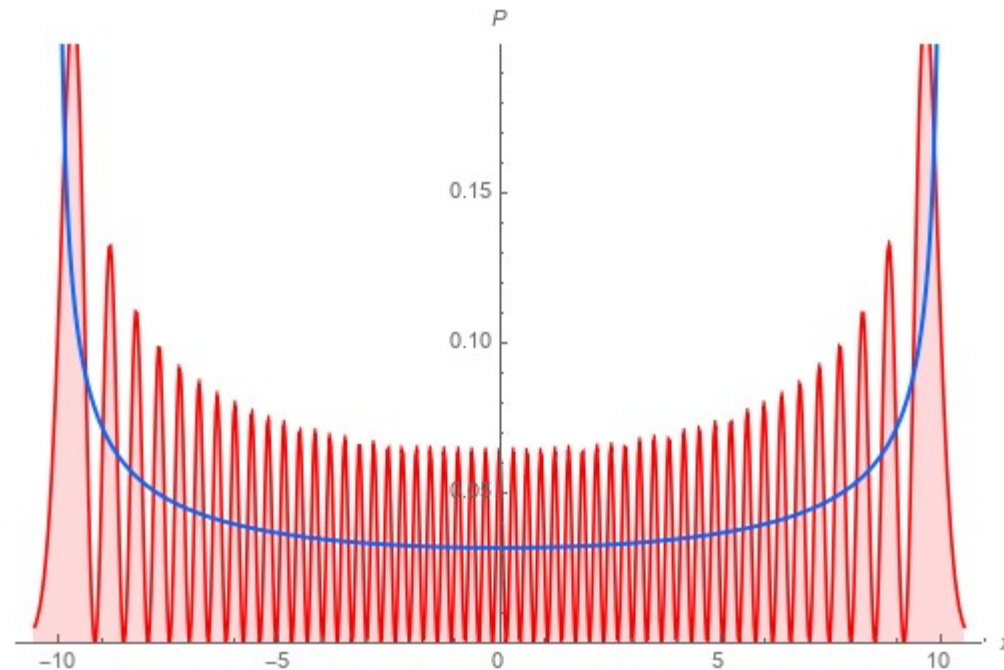
Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

während einer halben Periodendauer T : $dw = \frac{2}{T} dt$

$$\begin{aligned} \text{mit } dt &= dx \frac{1}{\frac{dx}{dt}} \\ \rightarrow dw &\propto \frac{1}{v(x)T} dx \\ \Rightarrow w(x) &\propto \frac{1}{v(x)T} \end{aligned}$$



<https://demonstrations.wolfram.com/QuantumClassicalCorrespondenceForTheHarmonicOscillator.cdf>

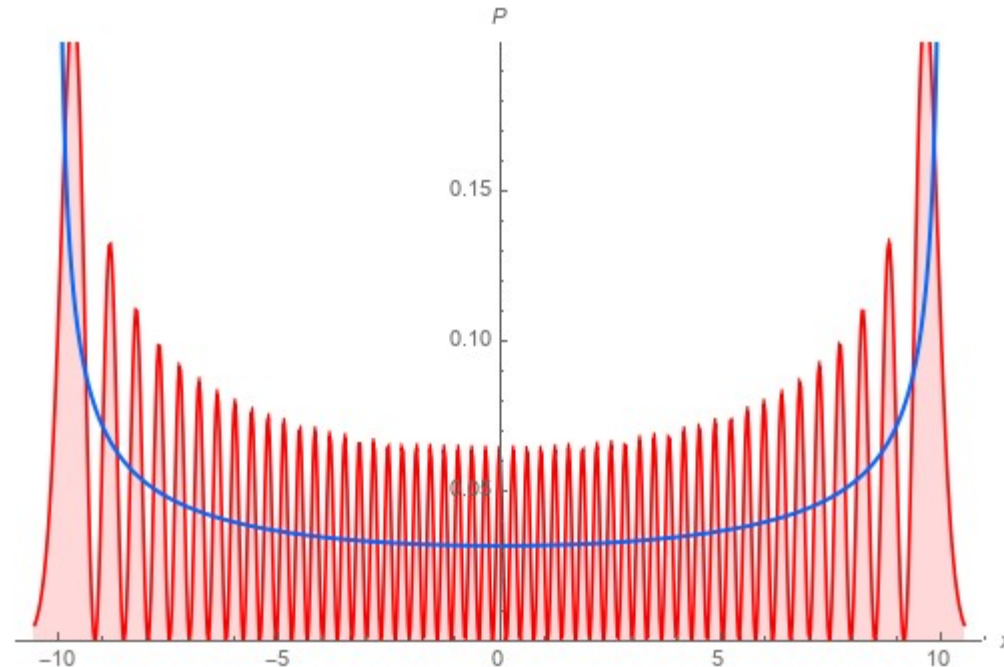
Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

? Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein klassischer Oszillator mit Periodendauer T am Ort x (wenn man immer wieder zufällig nachschaut) ?

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

während einer halben Periodendauer T : $dw = \frac{2}{T} dt$

$$\begin{aligned} \text{mit } dt &= dx \frac{1}{\frac{dx}{dt}} \\ \rightarrow dw &\propto \frac{1}{v(x)T} dx \\ \Rightarrow w(x) &\propto \frac{1}{v(x)T} \end{aligned}$$



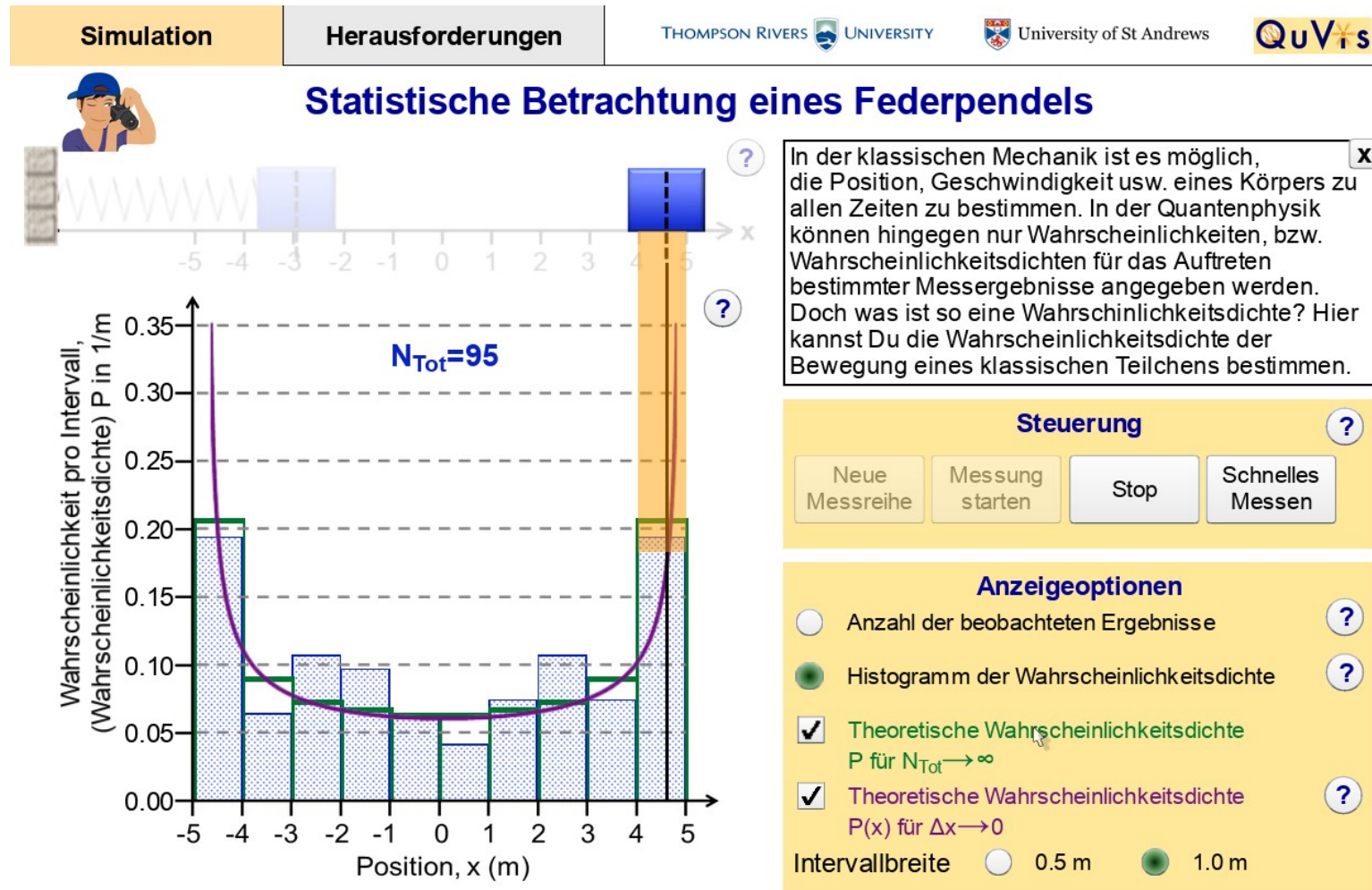
<https://demonstrations.wolfram.com/QuantumClassicalCorrespondenceForTheHarmonicOscillator.cdf>

Quantenmechanische und klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit

näher sich für große n an

→ Bohrs Korrespondenzprinzip

Zur Illustration gibt es eine sehr schöne Web-App von der St. Andrews University:



<https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/de/simulations/sims/classical-oscillator-de/classical-oscillator-de.html>

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Beispiel harmonischer Oszillator: $\psi_0 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \rightarrow |\psi_0|^2 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Beispiel harmonischer Oszillator: $\psi_0 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \rightarrow |\psi_0|^2 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$

Das ist eine Gaußverteilung mit Varianz $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Beispiel harmonischer Oszillator: $\psi_0 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \rightarrow |\psi_0|^2 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$

Das ist eine Gaußverteilung mit Varianz $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$

Die Varianz des Impulses ergibt sich mit $\langle p \rangle = 0$ zu

$$(\Delta p)^2 = \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | \psi_0 \rangle = \dots = \frac{1}{2} \hbar m \omega$$

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Beispiel harmonischer Oszillator: $\psi_0 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \rightarrow |\psi_0|^2 \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$

Das ist eine Gaußverteilung mit Varianz $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$

Die Varianz des Impulses ergibt sich mit $\langle p \rangle = 0$ zu

$$(\Delta p)^2 = \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | \psi_0 \rangle = \dots = \frac{1}{2} \hbar m \omega$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

der Grundzustand des harmonischen Oszillators
erfüllt die Unschärferelation exakt !

Wenn ein Teilchen in einem Potential **gebunden** ist, ist es dort **lokalisiert**

→ die Ortsunschärfe Δx ist endlich

Aus der Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ folgt ,

dass auch der Impuls eine Unschärfe haben muss: $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$

Beispiel harmonischer Oszillator: $\psi_0 \propto \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2) \rightarrow |\psi_0|^2 \propto \exp(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)$

Das ist eine Gaußverteilung mit Varianz $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$

Die Varianz des Impulses ergibt sich mit $\langle p \rangle = 0$ zu

$$(\Delta p)^2 = \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | \psi_0 \rangle = \dots = \frac{1}{2} \hbar m \omega$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

der Grundzustand des harmonischen Oszillators
erfüllt die Unschärferelation exakt !

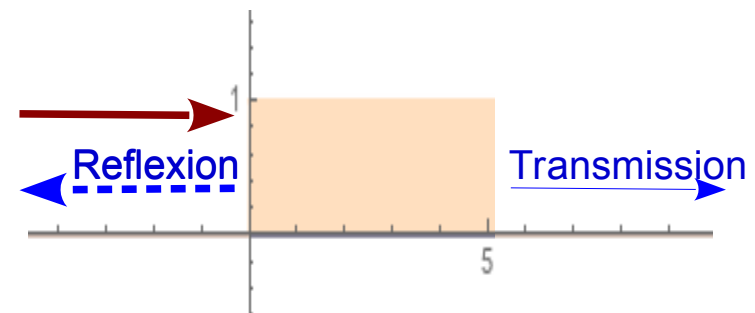
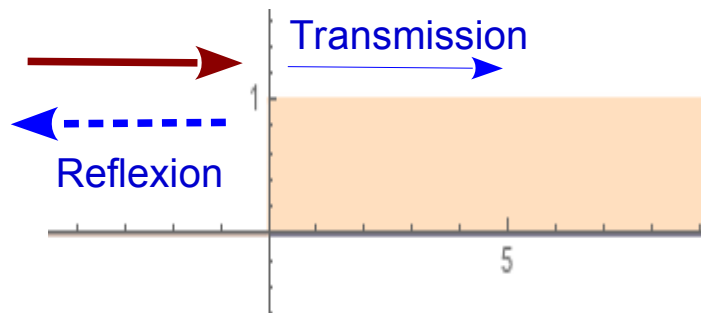
Auch bei anderen Potentialformen kann man die Unschärferelation anwenden, um die Größenordnung des Impulses im Grundzustand und damit die Grundzustandsenergie abzuschätzen : $p_0 \simeq \Delta p$

Ein **konstanter Teilchenstrom $\vec{j}$** kann durch
eine **komplexe ebene Welle** $A \exp i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$ beschrieben werden.

$$\text{Es gilt: } \vec{j} = \rho \cdot \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot |A|^2$$

Typische Beispiele:

Streuung eines Teilchenstrahls an Potentialstufe und Potentialwall (1-dim.).



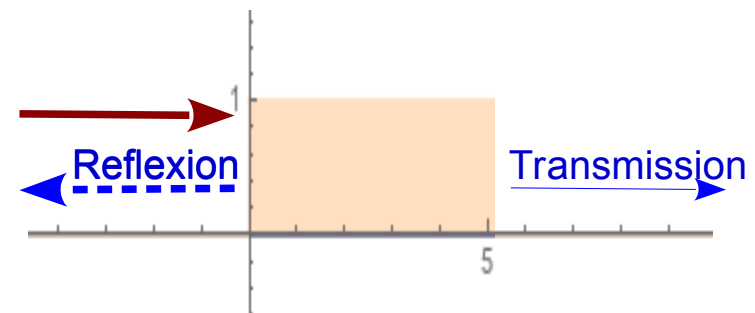
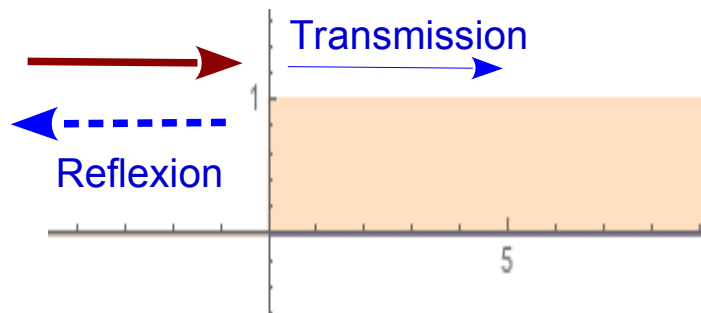
Ein **konstanter Teilchenstrom $\vec{j}$** kann durch eine **komplexe ebene Welle** $A \exp i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$ beschrieben werden.

$$\text{Es gilt: } \vec{j} = \rho \cdot \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot |A|^2$$

Die **stationäre Schrödingergleichung** ist **anwendbar**.

Typische Beispiele:

Streuung eines Teilchenstrahls an Potentialstufe und Potentialwall (1-dim.).



Ein **konstanter Teilchenstrom $\vec{j}$** kann durch eine **komplexe ebene Welle** $A \exp i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$ beschrieben werden.

$$\text{Es gilt: } \vec{j} = \rho \cdot \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot |A|^2$$

Die **stationäre Schrödingergleichung** ist **anwendbar**.

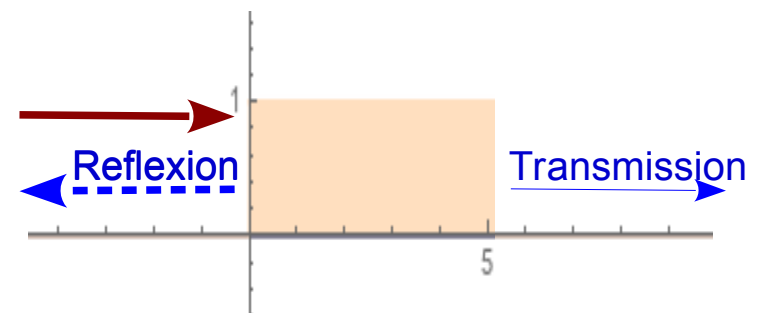
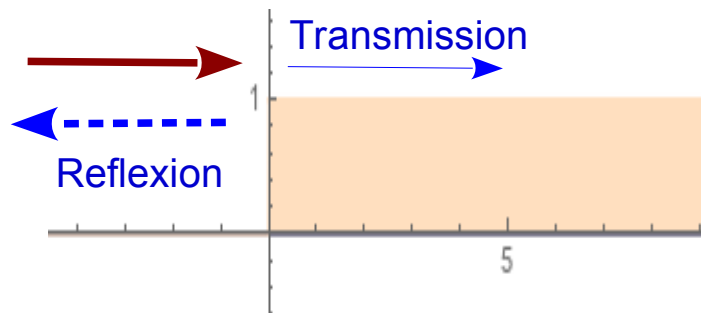
Einlaufende ebene Welle: $\Psi_1(x, t) = \frac{j m}{\hbar k} \exp(ikx) \exp(-i\omega t) = \psi(x) \exp(-i\omega t)$

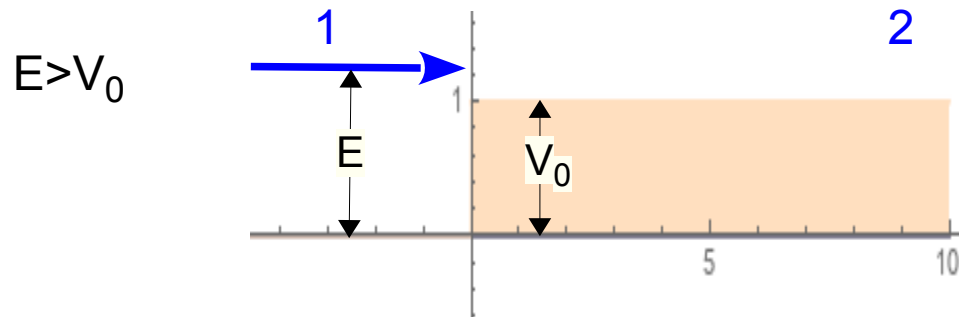
$\Psi_1(x, t)$ ist Lösung der freien S-Gl.

$\psi_1(x)$ ist Lösung der stationären, freien S-Gl.

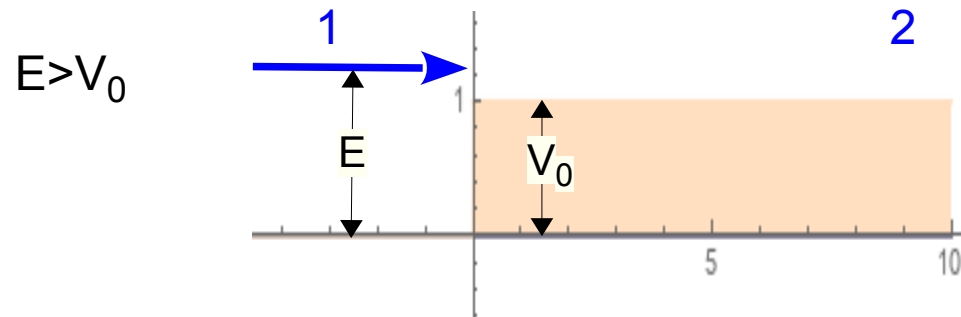
Typische Beispiele:

Streuung eines Teilchenstrahls an Potentialstufe und Potentialwall (1-dim.).





$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

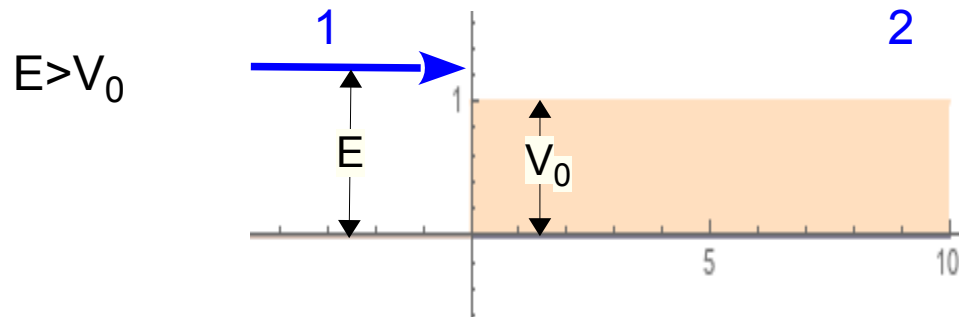


$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1:

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1:

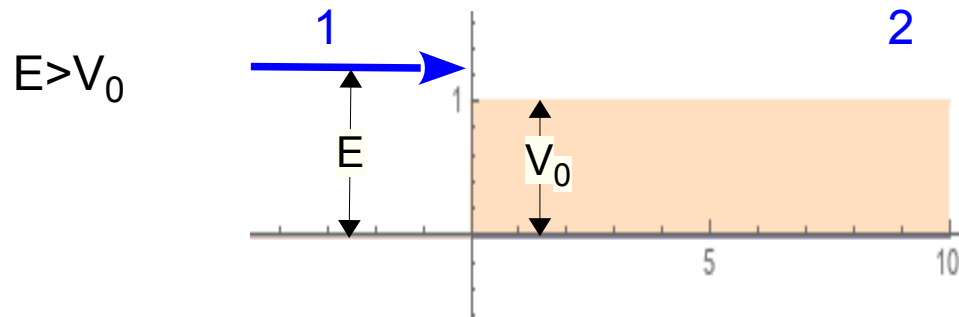
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

S-Gl. für Gebiet 2:

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

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



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1:

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

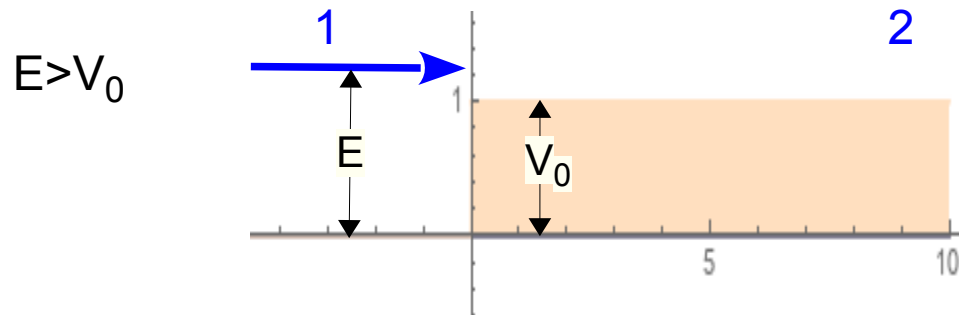
$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

S-Gl. für Gebiet 2:

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

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

komplexe Schwingungsgleichungen mit unterschiedlichen Wellenzahlen



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1:

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

S-Gl. für Gebiet 2:

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

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

komplexe Schwingungsgleichungen mit unterschiedlichen Wellenzahlen

Ansatz: $\psi_1(x) = A (\exp(ikx) + R \exp(-ikx))$ $\psi_2(x) = AT \exp(iqx)$

durchgehend

reflektiert

Transmission in
Gebiet 2

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R)$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R) \Leftrightarrow k - q = (k + q)R \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R) \Leftrightarrow k - q = (k + q)R \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\Rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R) \Leftrightarrow k - q = (k + q)R \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\Rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$

Interpretation: Wahrscheinlichkeit für Reflexion und Transmission

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R) \Leftrightarrow k - q = (k + q)R \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\Rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$

Interpretation: Wahrscheinlichkeit für Reflexion und Transmission

■ Reflexionskoeffizient: $r = |R|^2$

Stetigkeit von ψ und ψ' bei $x=0$:

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi(0) = A(1 + R) \\ (2) \psi(0) = AT \end{array} \right\} 1 + R = T$$

$$\left. \begin{array}{l} (1) \psi' = ikA (\exp(ikx) - R \exp(-ikx)) \\ (2) \psi' = iqAT \exp(iqx) \end{array} \right\} ik(1 - R) = iqT$$

$$\Rightarrow k(1 - R) = q(1 + R) \Leftrightarrow k - q = (k + q)R \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\Rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$

Interpretation: Wahrscheinlichkeit für Reflexion und Transmission

■ Reflexionskoeffizient: $r = |R|^2$

■ Transmissionskoeffizient: $t = 1 - r = \frac{q}{k}|T|^2$

Grafische Darstellung der Lösung

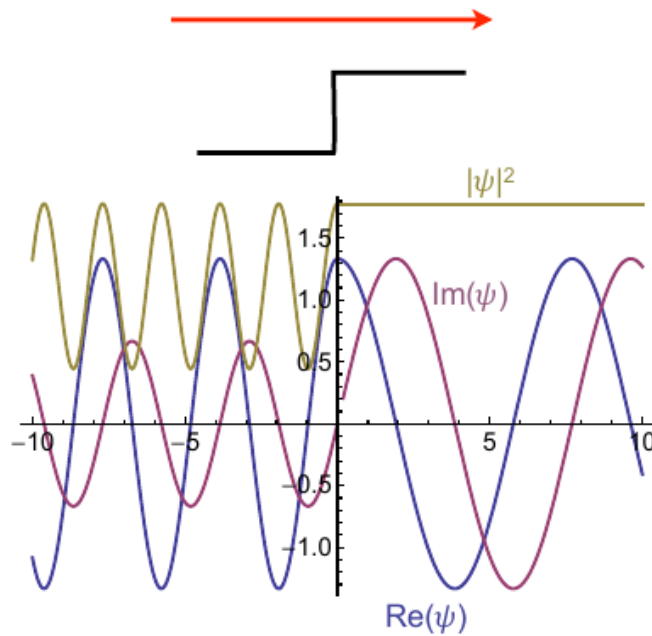
Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$

Grafische Darstellung der Lösung

Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

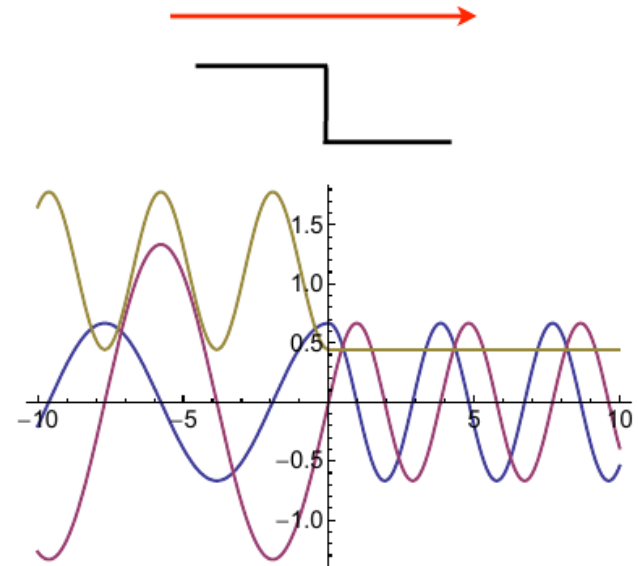
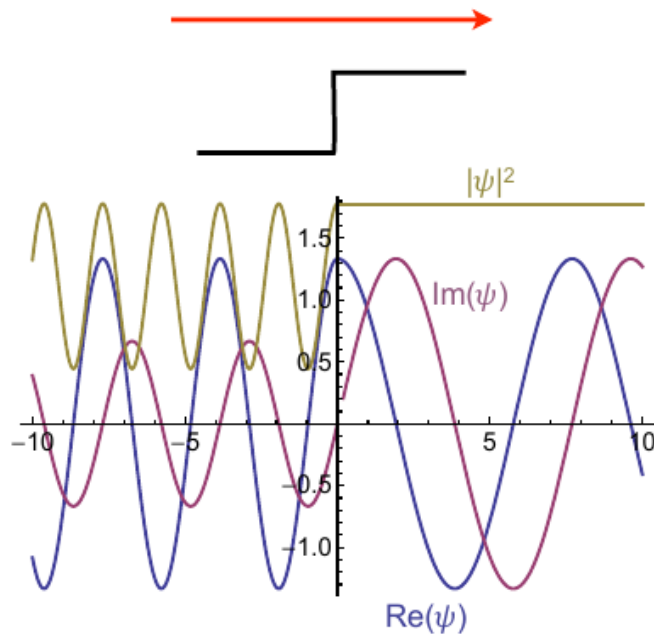
- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$



Grafische Darstellung der Lösung

Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

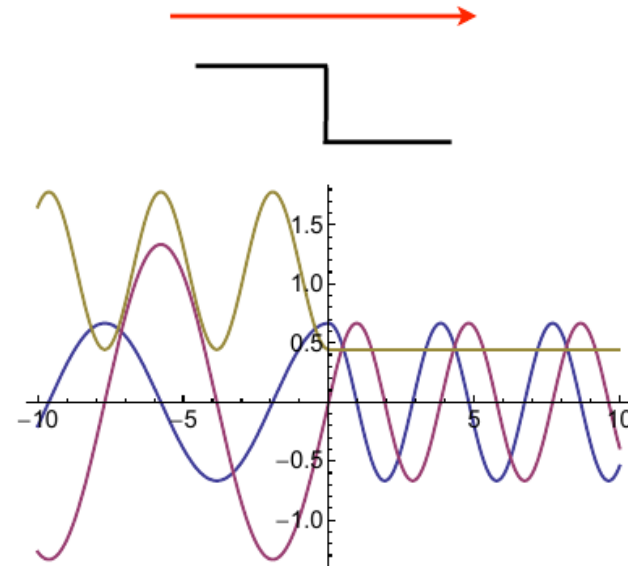
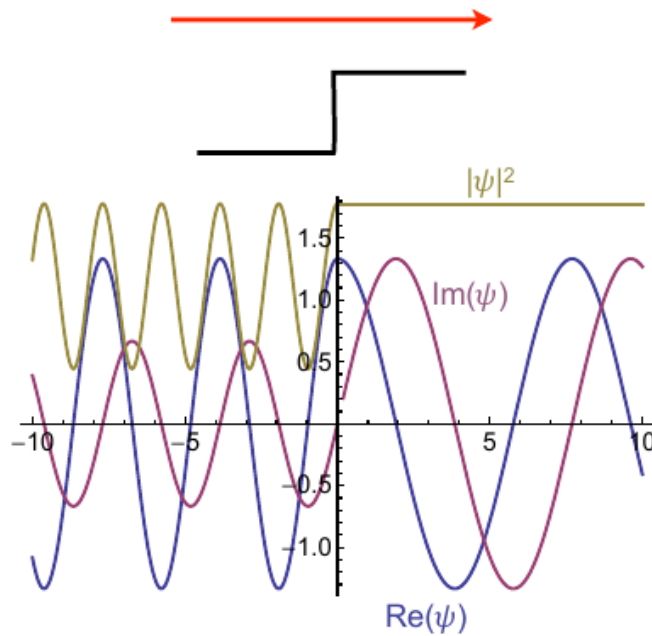
- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$



Grafische Darstellung der Lösung

Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$

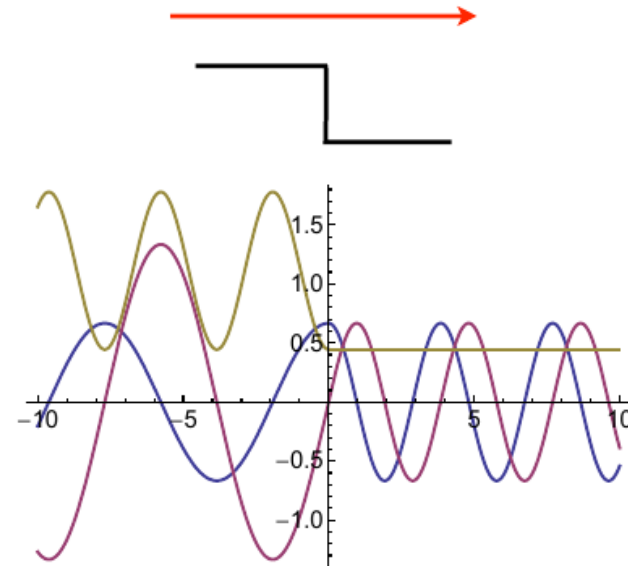
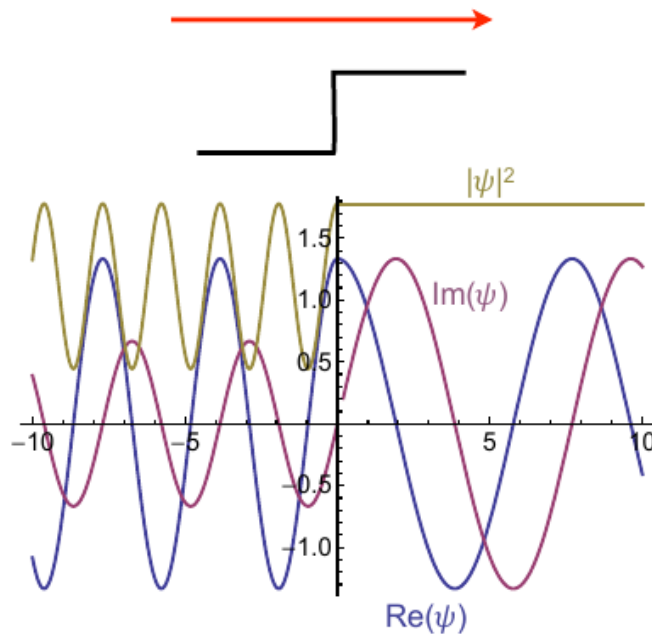


- $r \neq 0$ Reflexion analog zu Licht an Grenze, nicht erwartet für klass. Teilchen

Grafische Darstellung der Lösung

Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$

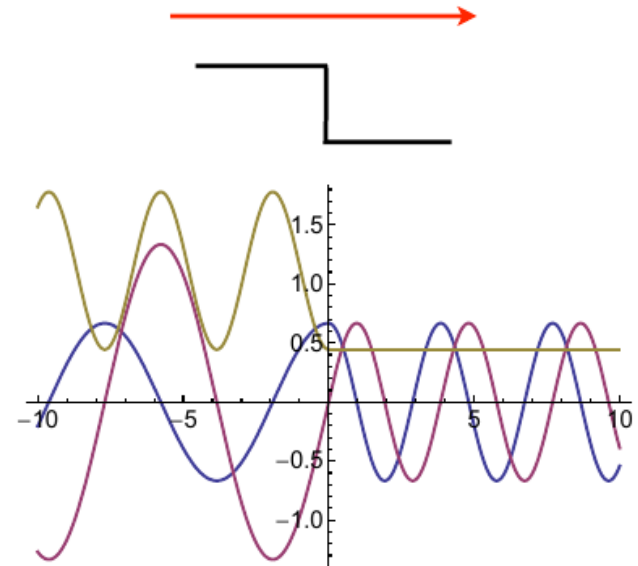
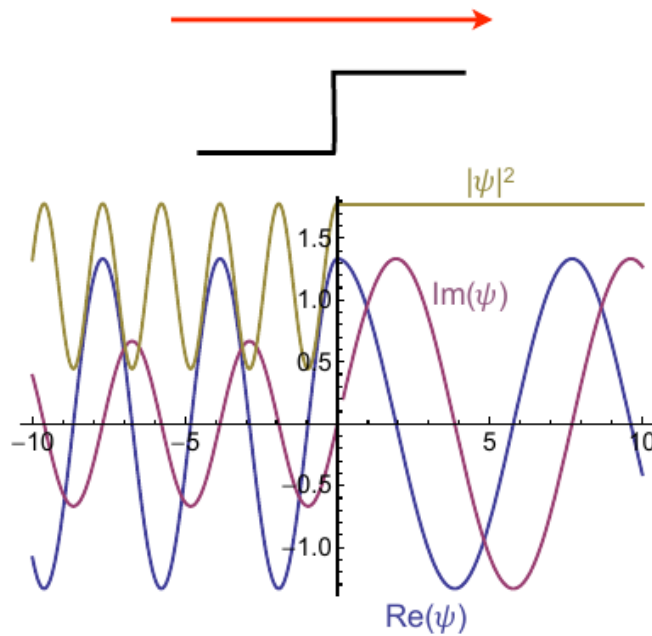


- $r \neq 0$ Reflexion analog zu Licht an Grenze, nicht erwartet für klass. Teilchen
- Änderung der Wellenzahl $k > q$, nicht erwartet für klass. Welle

Grafische Darstellung der Lösung

Parameterwahl: $V_0 = \hbar = m = 1$; $E = 4/3$

- $q/k = 1/2$ (Stufe hinauf) bzw. $q/k = 2$ (Stufe hinunter)
- Reflexionskoeffizient: $r = 1/9$, Transmissionskoeffizient: $t = 8/9$

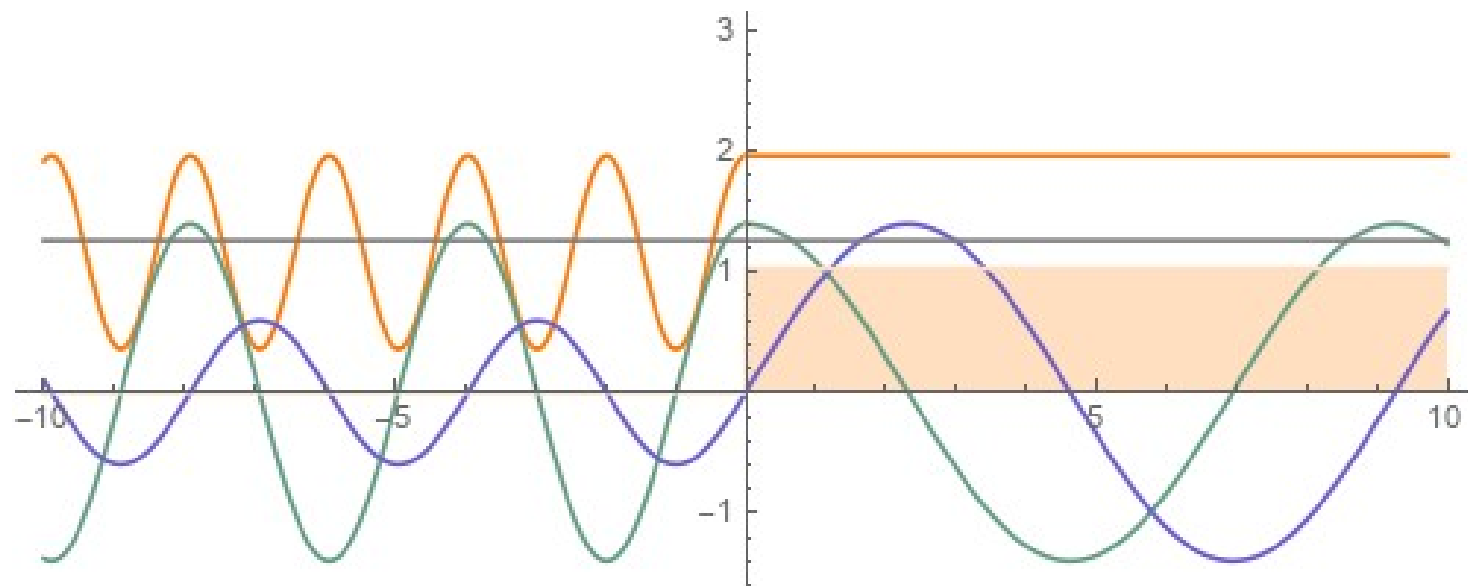


- $r \neq 0$ Reflexion analog zu Licht an Grenze, nicht erwartet für klass. Teilchen
- Änderung der Wellenzahl $k > q$, nicht erwartet für klass. Welle
- $r \propto (k - q)^2$ unabhängig von Laufrichtung der Welle

$$E > V_0$$

Zum Ausprobieren:

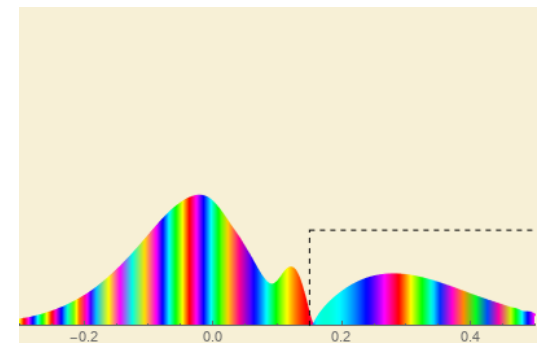
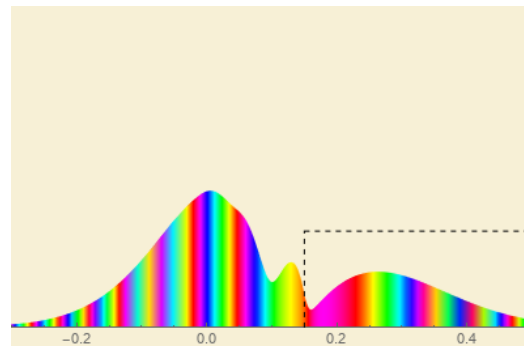
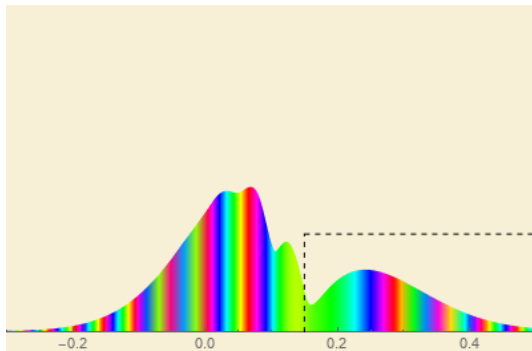
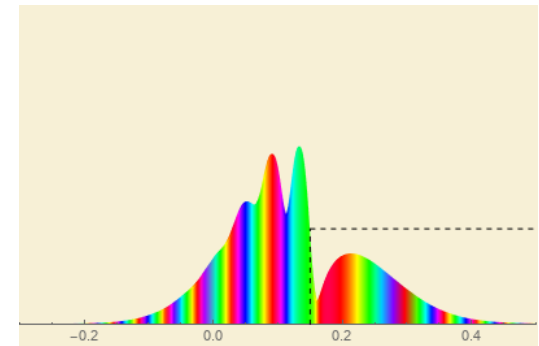
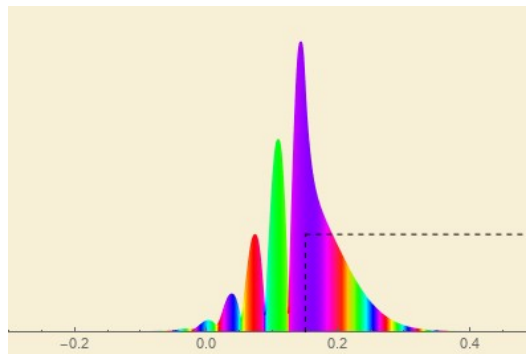
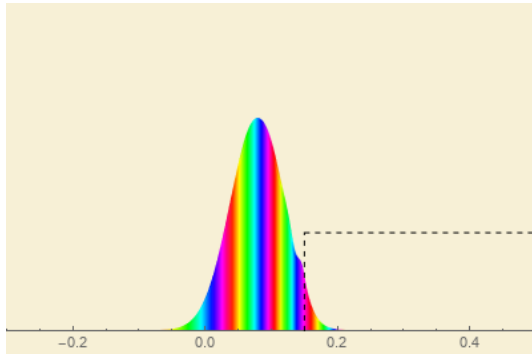
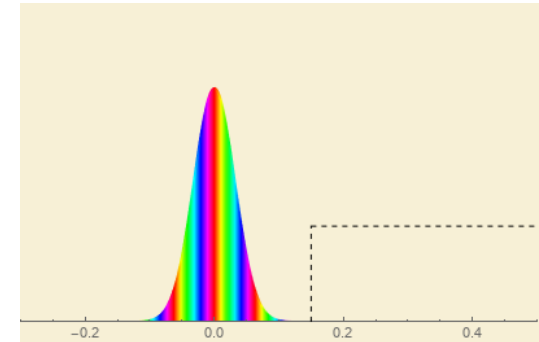
Simulation mit Mathematica



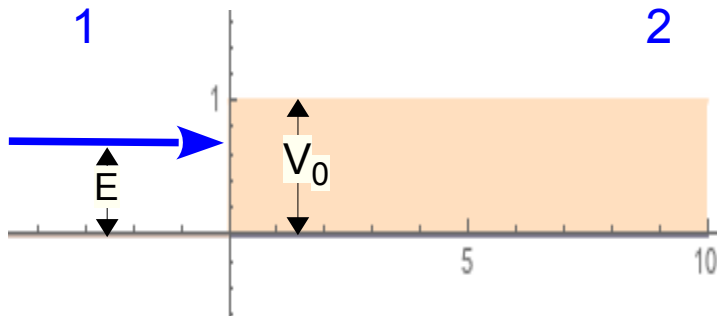
Animiertes Wellenpaket mit $E > V_0$ an der Potentialstufe

Link: Staatsexamensarbeit J. Rosenkranz, Karlsruhe (2013)

Lösung der zeitabhängigen S-Gl. mit Mathematica



$$E < V_0$$



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1 wie oben:

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

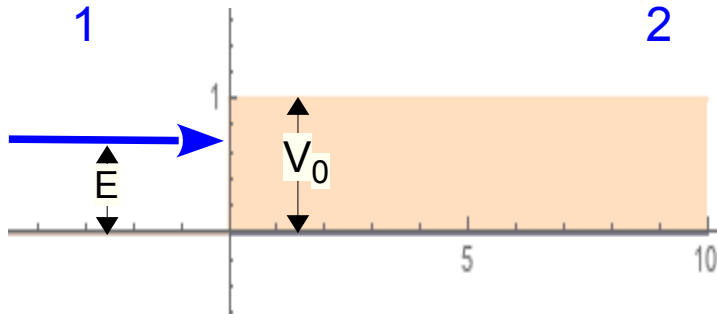
Ansatz:

$$\psi_1(x) = A (\exp(ikx) + R \exp(-ikx))$$

durchgehend

reflektiert

$$E < V_0$$



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1 wie oben:

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

Ansatz:

$$\psi_1(x) = A (\exp(ikx) + R \exp(-ikx))$$

durchgehend

reflektiert

S-Gl. für Gebiet 2:

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

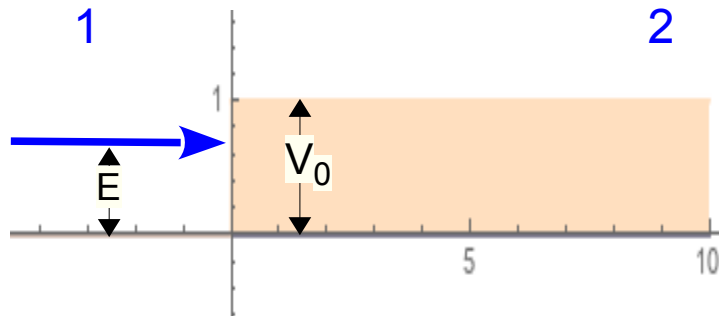
$$\psi'' = -\frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi := \kappa^2 \psi$$

Ansatz:

$$\psi_2(x) = AT \exp(\kappa x)$$

Dämpfung in Gebiet 2

$$E < V_0$$



$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

S-Gl. für Gebiet 1 wie eben:

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

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi := -k^2 \psi$$

Ansatz:

$$\psi_1(x) = A (\underbrace{\exp(ikx)}_{\text{durchgehend}} + \underbrace{R \exp(-ikx)}_{\text{reflektiert}})$$

S-Gl. für Gebiet 2:

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

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

Ansatz:

$$\psi_2(x) = A T \exp(\kappa x)$$

Dämpfung in Gebiet 2

Lösungen der Stetigkeitsbedingungen:

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \rightarrow r = |R|^2 = R^* R = 1 \quad \text{immer vollständige Reflexion !}$$

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa} \quad \rightarrow \quad t = \frac{i\kappa}{k} |T|^2 = i \frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \neq 0$$

**rein imaginär,
kein Teilchenstrom!**

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa} \quad \rightarrow \quad t = \frac{i\kappa}{k} |T|^2 = i \frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \neq 0$$

**rein imaginär,
kein Teilchenstrom!**

Wellenfunktion **dringt** um Länge $\frac{1}{\kappa}$

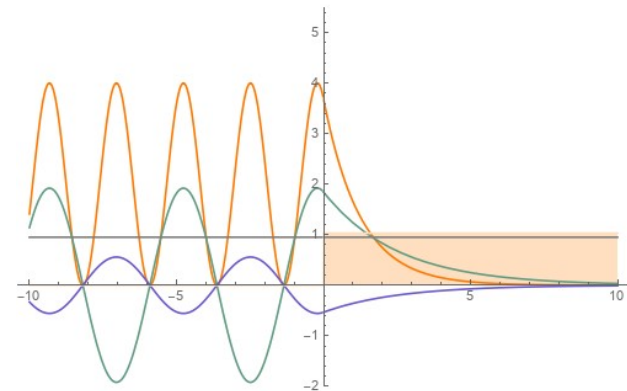
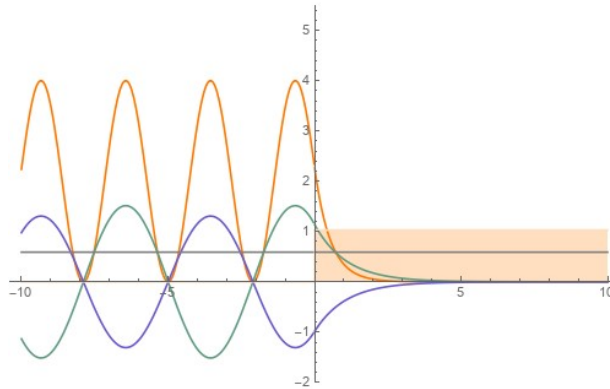
in klassisch verbotenen Bereich ein ($\psi \propto \exp(-\kappa x)$)

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa} \quad \rightarrow \quad t = \frac{i\kappa}{k} |T|^2 = i \frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \neq 0$$

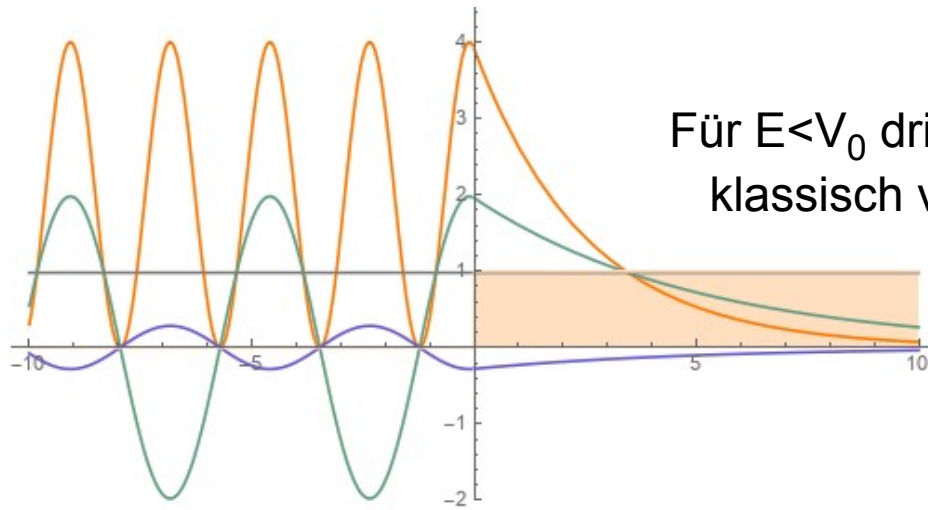
**rein imaginär,
kein Teilchenstrom!**

Wellenfunktion **dringt** um Länge $\frac{1}{\kappa}$
in klassisch verbotenen Bereich ein ($\psi \propto \exp(-\kappa x)$)

$E < V_0$

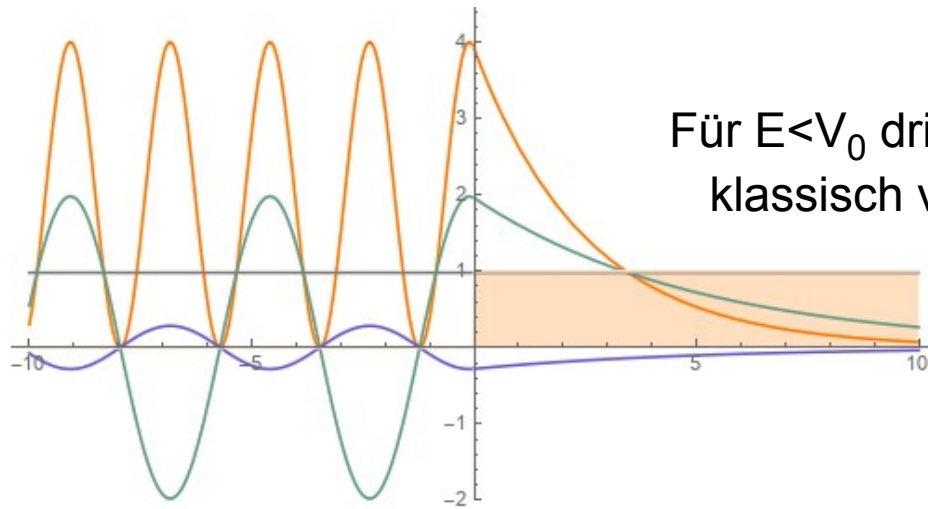


Für $E < V_0$ wird der gesamte Strom reflektiert,
die Wellenfunktion dringt aber – exponentiell abfallend –
in den klassisch verbotenen Bereich ein !



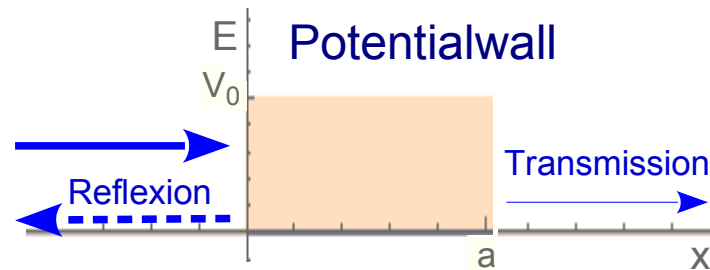
Für $E < V_0$ dringt die Wellenfunktion in den klassisch verbotenen Bereich ein.

Was wäre, wenn die Stufe kürzer wäre ?

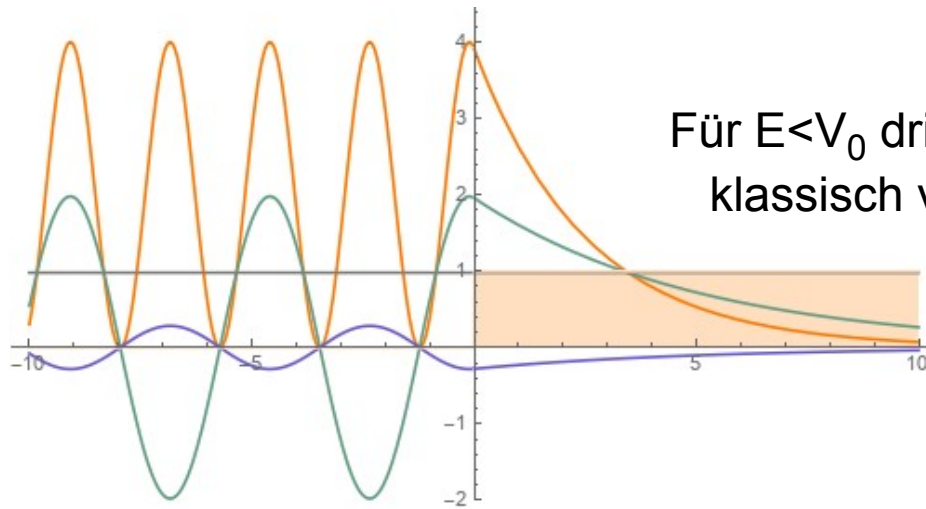


Für $E < V_0$ dringt die Wellenfunktion in den klassisch verbotenen Bereich ein.

Was wäre, wenn die Stufe kürzer wäre ?

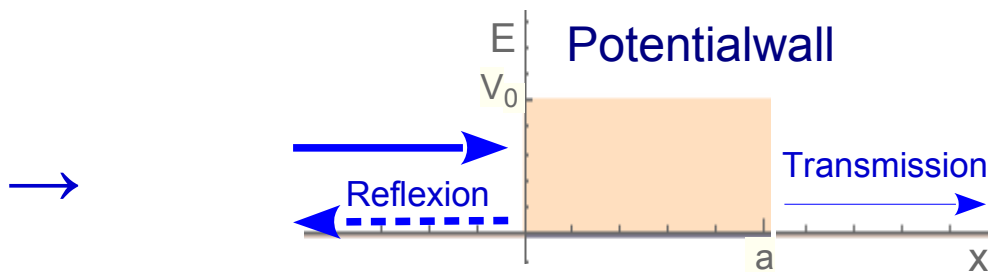


$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$



Für $E < V_0$ dringt die Wellenfunktion in den klassisch verbotenen Bereich ein.

Was wäre, wenn die Stufe kürzer wäre ?

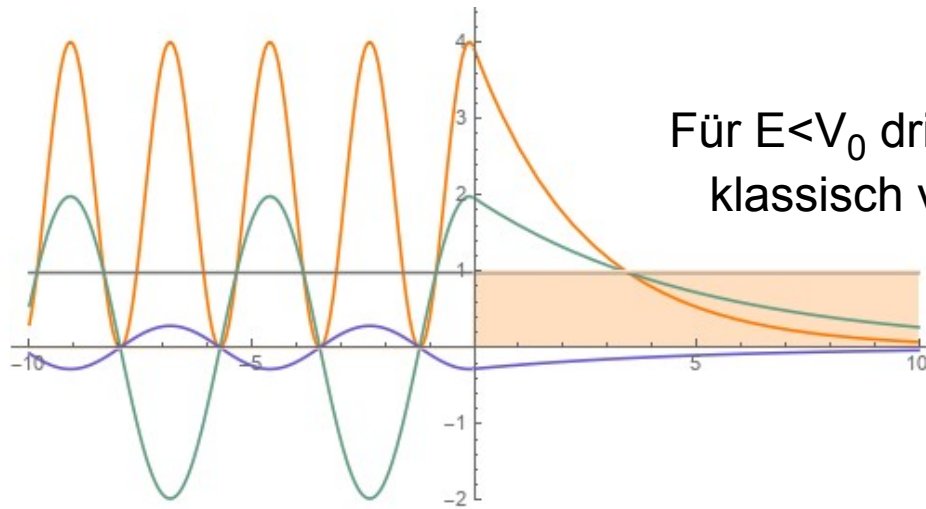


$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Ansätze

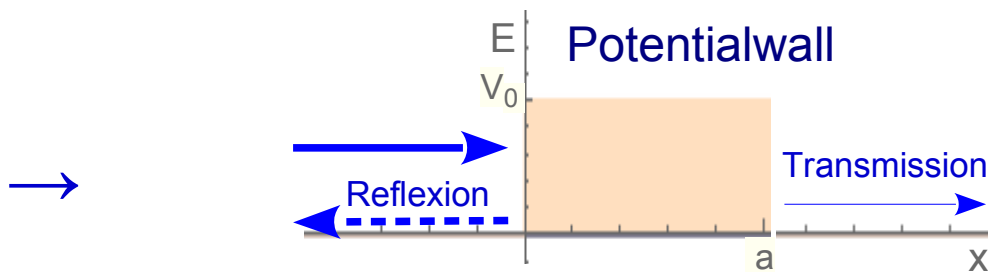
mittlerweile offensichtlich :

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & x < 0 \\ C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x) & 0 < x < a \\ F \exp(ikx) + G \exp(-ikx) & x > a \end{cases}$$



Für $E < V_0$ dringt die Wellenfunktion in den klassisch verbotenen Bereich ein.

Was wäre, wenn die Stufe kürzer wäre ?



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Ansätze

mittlerweile offensichtlich :

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & x < 0 \\ C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x) & 0 < x < a \\ F \exp(ikx) + G \exp(-ikx) & x > a \end{cases}$$

6 Parameter an zwei Grenzen zu bestimmen → längere Rechnung

Ergebnis:

$$\text{Transmissionskoeffizient } t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa a)} \propto \exp(-\kappa a) \quad \text{für } \kappa a \gg 1$$

Ergebnis:

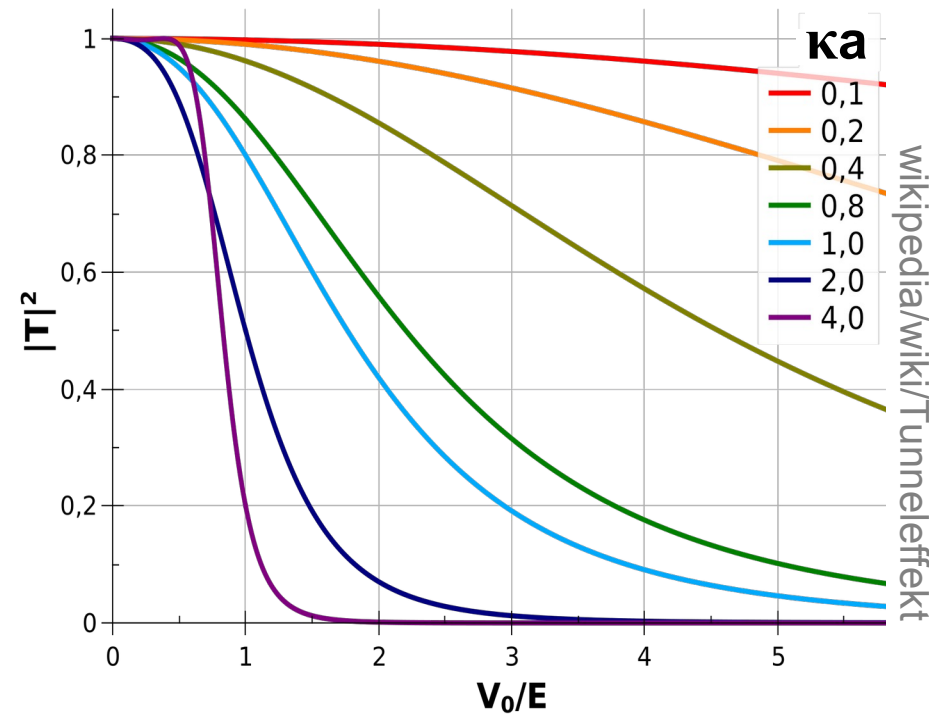
$$\text{Transmissionskoeffizient } t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa a)} \propto \exp(-\kappa a) \quad \text{für } \kappa a \gg 1$$

Quantenteilchen „tunneln“ durch klassisch unüberwindbare Potentialbarrieren!

Ergebnis:

Transmissionskoeffizient $t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa a)} \propto \exp(-\kappa a)$ für $\kappa a \gg 1$

Quantenteilchen „tunneln“ durch klassisch unüberwindbare Potentialbarrieren!



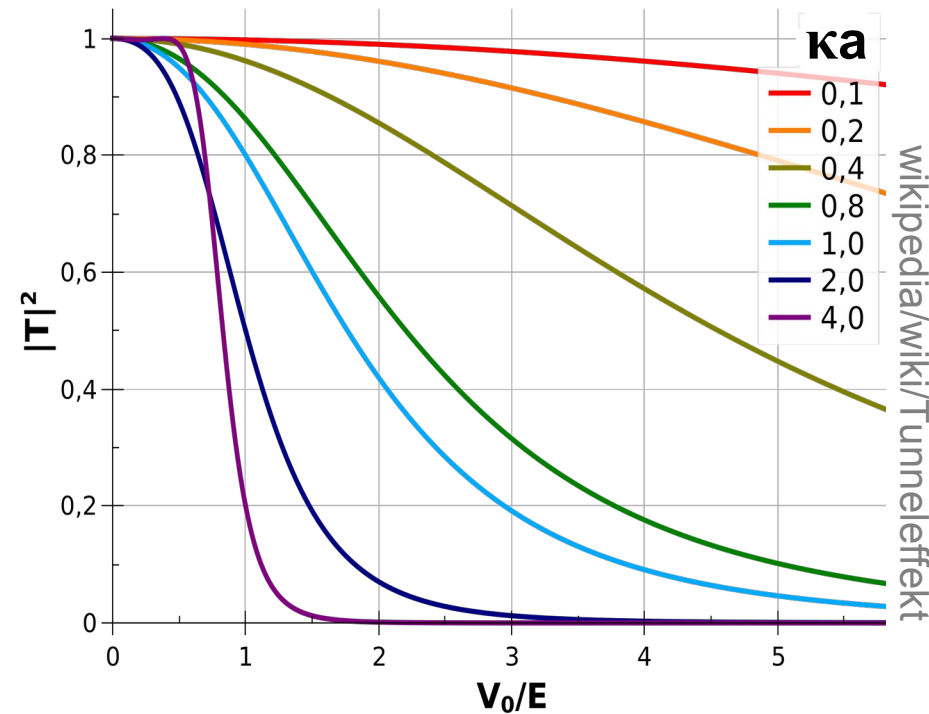
Ergebnis:

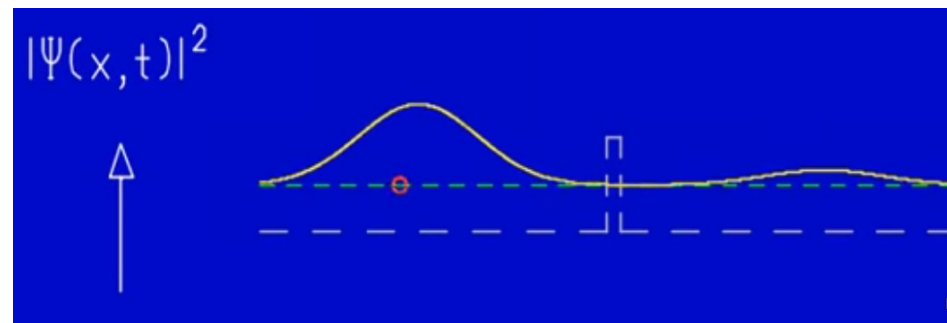
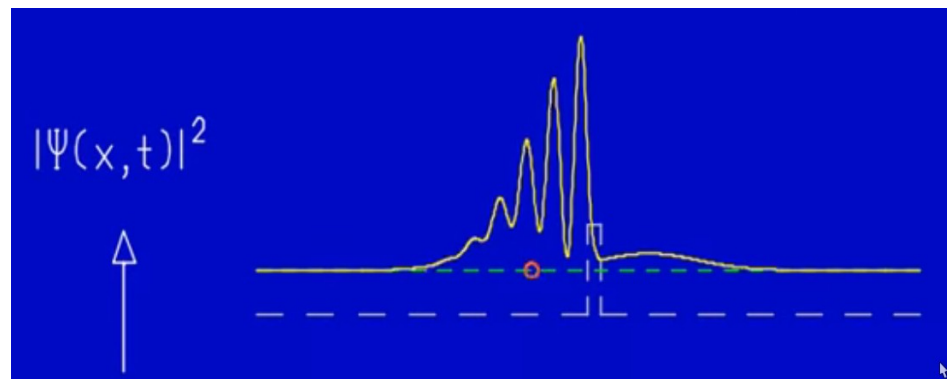
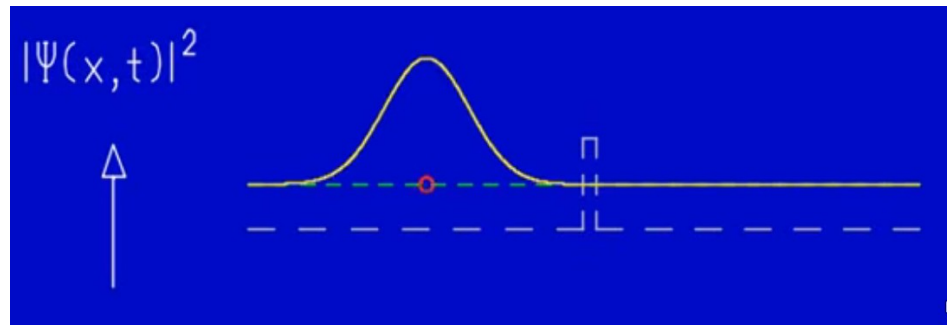
Transmissionskoeffizient $t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa a)} \propto \exp(-\kappa a)$ für $\kappa a \gg 1$

Quantenteilchen „tunneln“ durch klassisch unüberwindbare Potentialbarrieren!

Tunneleffekt Hat wichtige Bedeutung
für Physik und Technik:

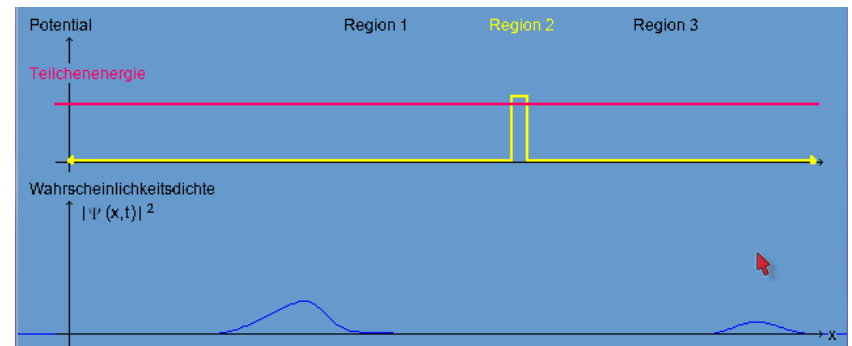
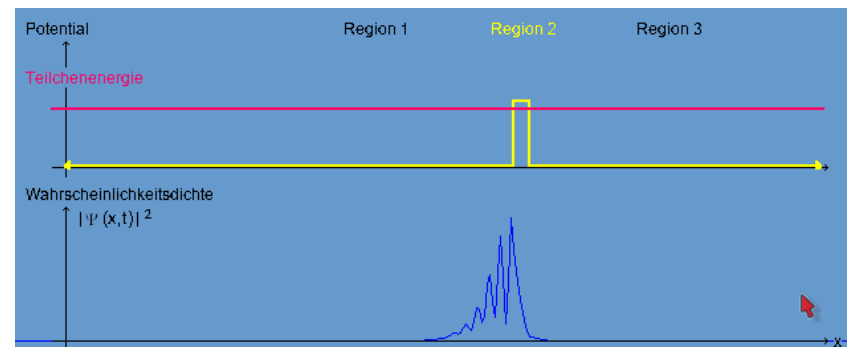
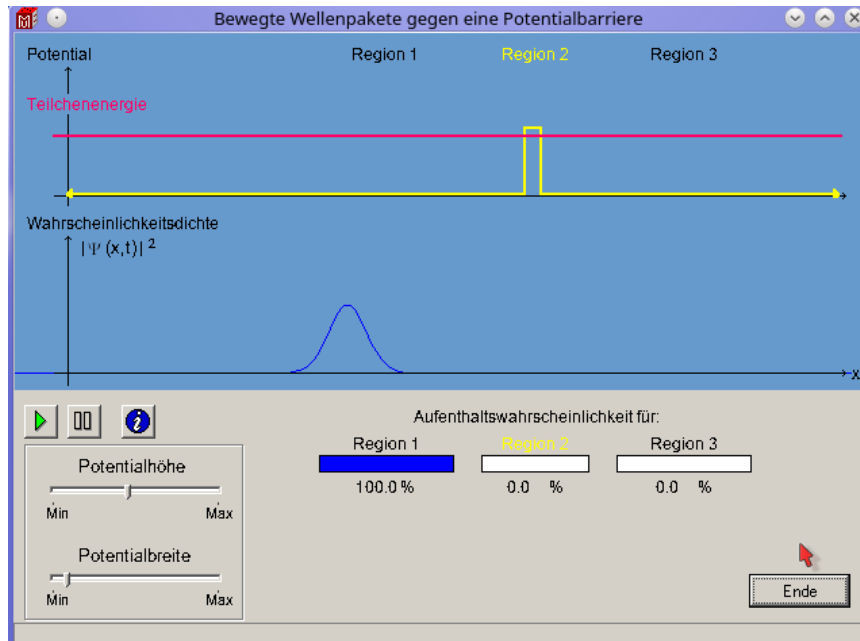
- Kernzerfälle, Kernfusion
- Chemische Reaktionen
- Molekulare Übergänge (z.B. NH_3 -Molekül)
- Supraleitung
- Elektronische Bauteile („Tunneldiode“)
- Rastertunnelmikroskop
- Leseköpfe in modernen Festplatten
- Flash-Speicher
- ...



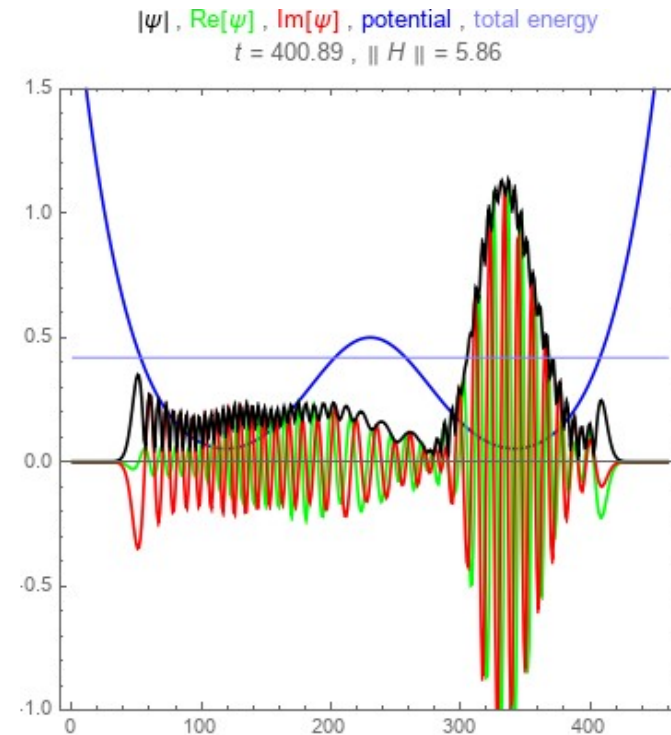
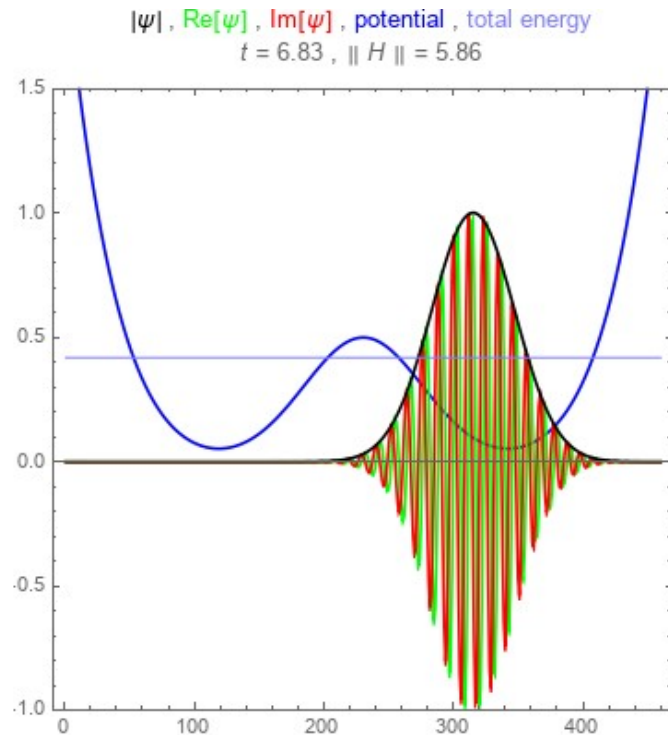


Windows-Programm **Alea** (1998),
erlaubt Einstellung der Parameter
über Schieberegler

Leider nicht mehr verfügbar
(Entwicklung Uni. Mainz, Vertrieb Klett Verlag).

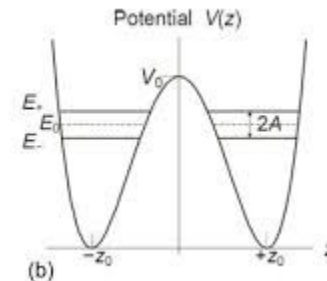
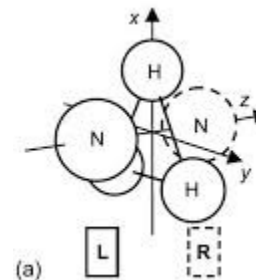


Simulation mit Mathematica



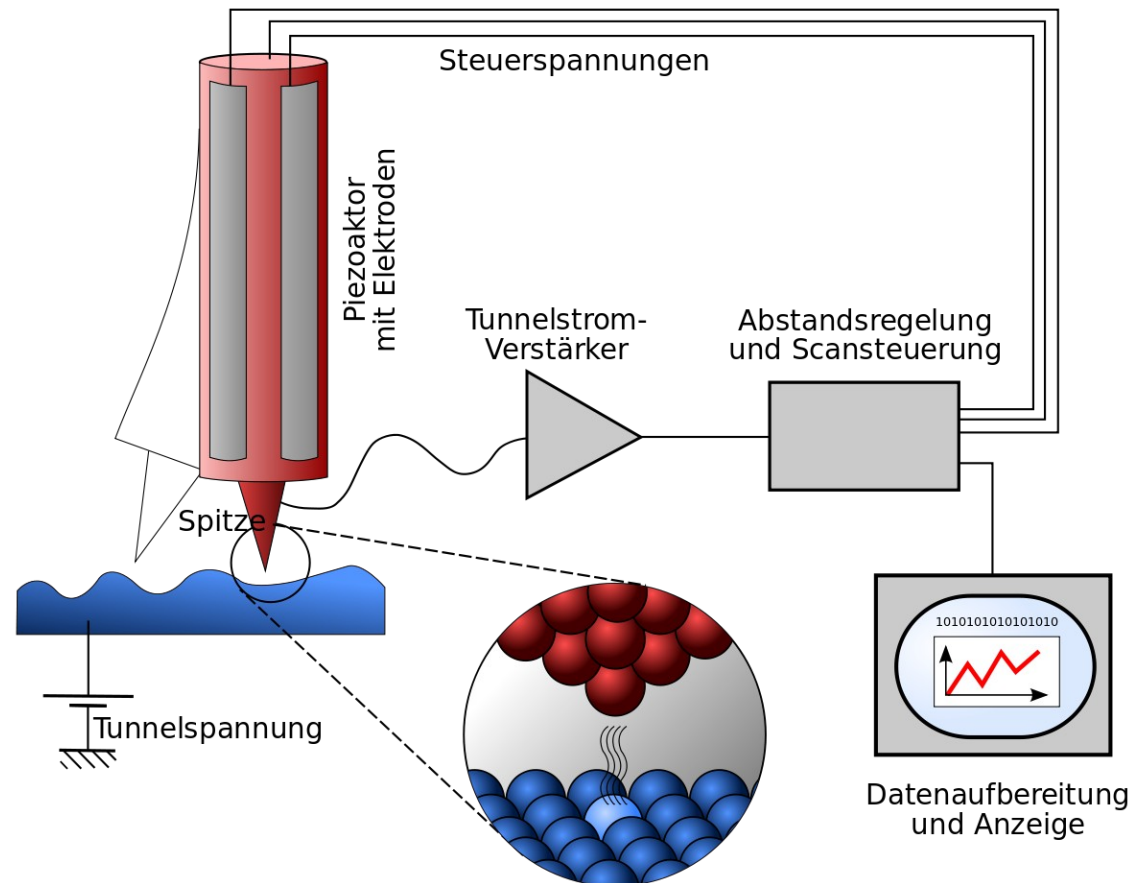
Konkretes Beispiel NH_3 :

Stickstoffatom tunnelt mit einer Frequenz von ~ 2 GHz zwischen der linken und rechten Position



Rastertunnelmikroskop: engl.: STM = scanning tunneling microscope
(G. Binnig, H. Rohrer, 1979)

- Abtasten von Probenoberflächen mit sehr feiner **Spitze** (1 Atom!)
- Elektronen **tunneln** von Spitze zu Oberfläche
- Konstanter **Abstand** zur Oberfläche → konstanter **Tunnelstrom I_T** (pA bis nA)



Ende VL 08

und Zeit für Fragen ?

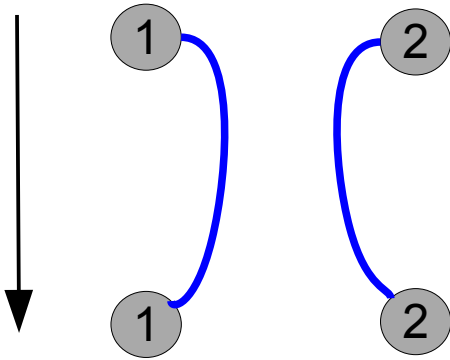
Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:

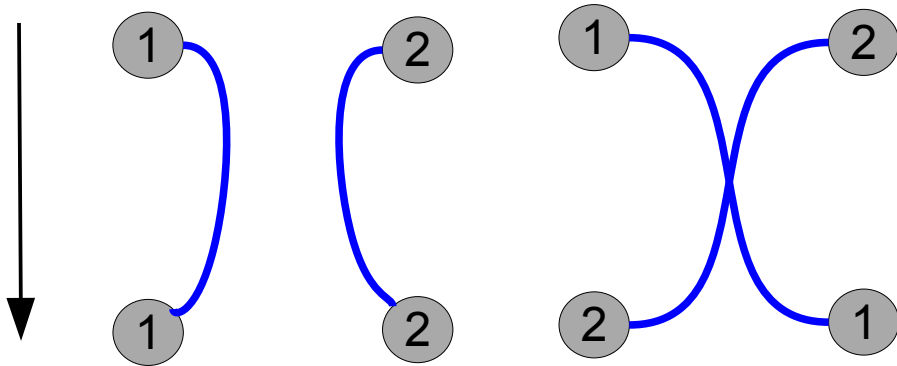
Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:



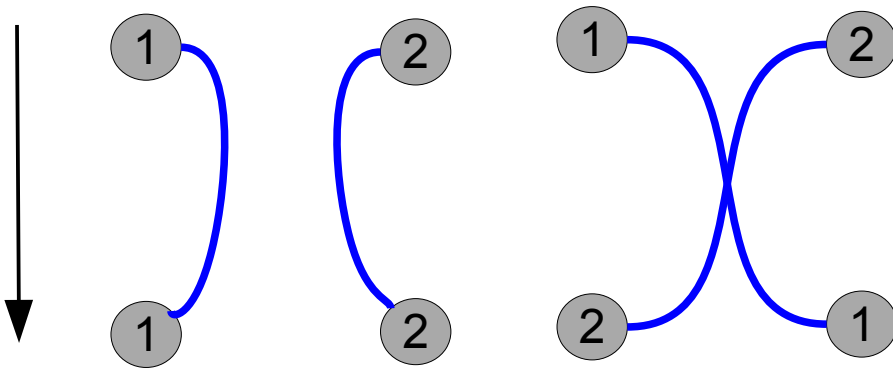
Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:



Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

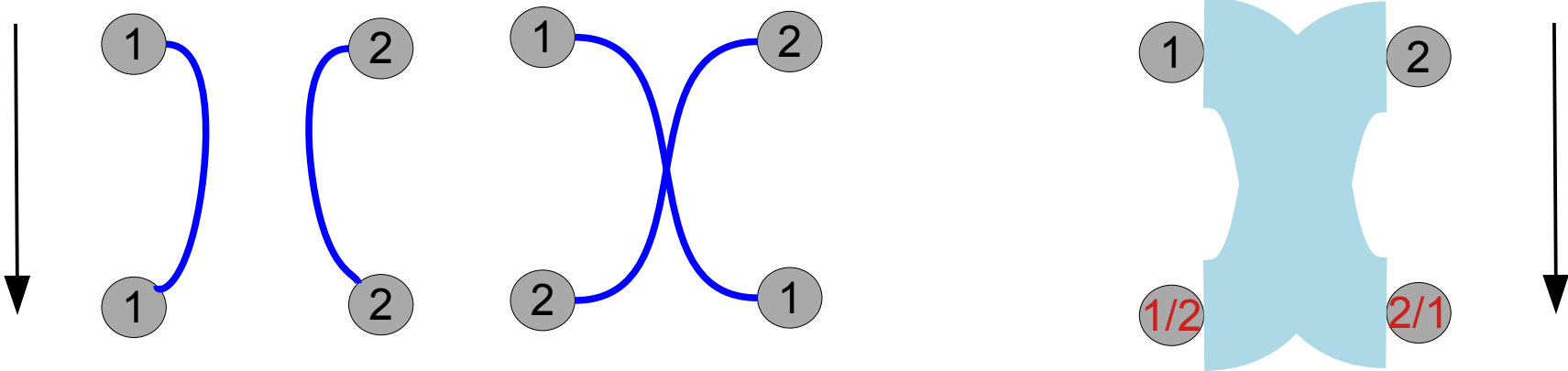
Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:



In der **klassischen Physik** erlaubt die Verfolgung der Teilchenbahnen, zu entscheiden, ob Teilchen 1 links oder rechts angekommen ist.

Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

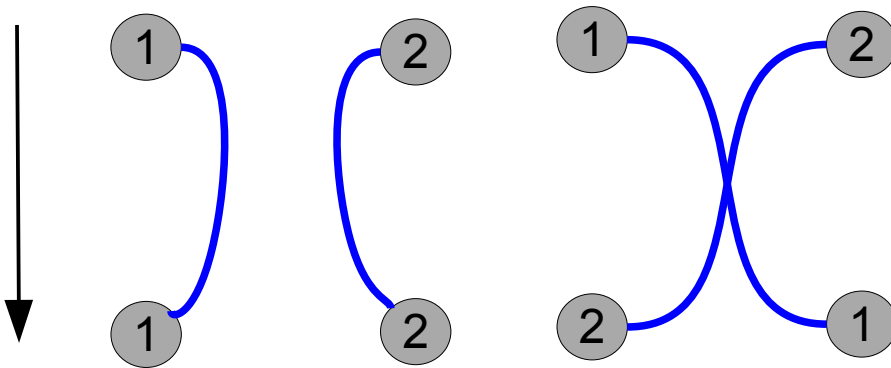
Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:



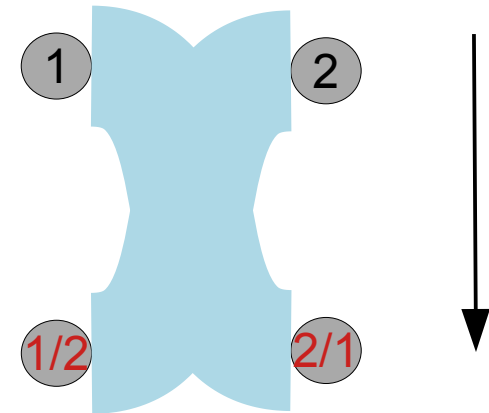
In der **klassischen Physik** erlaubt die Verfolgung der Teilchenbahnen, zu entscheiden, ob Teilchen 1 links oder rechts angekommen ist.

Prinzip: Quantenteilchen der gleichen Sorte sind ununterscheidbar.

Betrachten zwei gleiche Teilchen, die sich von oben nach unten bewegen:



In der **klassischen Physik** erlaubt die Verfolgung der Teilchenbahnen, zu entscheiden, ob Teilchen 1 links oder rechts angekommen ist.



In der **Quantenphysik** sind die Bahnen verschmiert; es ist nicht zu entscheiden, wo sich Teilchen (1) bzw. (2) am Ende befinden.

Beispiel:

zwei nicht miteinander wechselwirkende Teilchen im Kasten,
beschrieben durch eine gemeinsame Wellenfunktion $\psi(x_1, x_2, t)$

Stationäre S-Gl.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial^2 x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial^2 x_2^2} \right) + V(x_1, x_2) \right\} \psi(x_1, x_2) = E \psi(x_1, x_2)$$

mit $V=0$ im Kasten; **Produktansatz** $\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2)$

$$\Rightarrow \psi_{n,m}(x_1, x_2) = \psi_n(x_1) \psi_m(x_2)$$

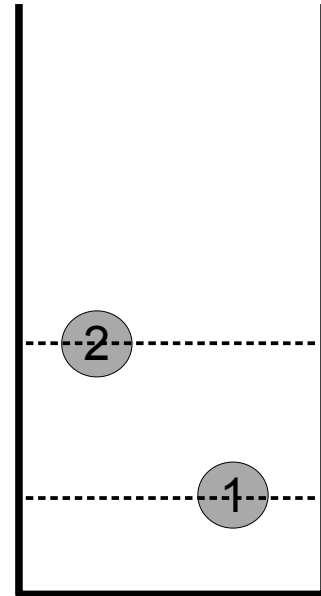
$$\text{z.B. } \psi_{1,2} = A \sin\left(\frac{\pi x_1}{l}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{l}\right)$$

Teilchen 1 im Zustand 1, Teilchen 2 im Zustand 2,

$$\langle x_1 \rangle = \int x_1 \psi_{1,2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int x_1 \psi_1(x_1) dx_1$$

$$\langle x_2 \rangle = \int x_2 \psi_{1,2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int x_2 \psi_2(x_2) dx_2$$

d.h. die Teilchen sind unterscheidbar !



Ununterscheidbar bedeutet:

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2 \quad \text{d.h. kein Unterschied bei Teilchenaustausch}$$

$\psi(x_1, x_2)$ und $\psi(x_2, x_1)$ dürften aber unterschiedlich sein !

Erinnerung: Die Schrödingergleichung ist eine lineare DGL

→ **Linearkombinationen von Lösungen sind auch Lösungen**
bei Teilchenaustausch

Bilden also Linearkombinationen, die $|\psi_{n,m}(\underline{x_1}, x_2)|^2 = |\psi_{n,m}(\underline{x_2}, x_1)|^2$ erfüllen

zwei Möglichkeiten:

$$1.) \quad \psi_{n,m}^S(x_1, x_2) = A (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) \oplus \psi_n(x_2)\psi_m(x_1))$$

$$2.) \quad \psi_{n,m}^A(x_1, x_2) = A (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1))$$

$$\psi^S(x_1, x_2) = +\psi^S(x_2, x_1) \quad \text{symmetrisch}$$

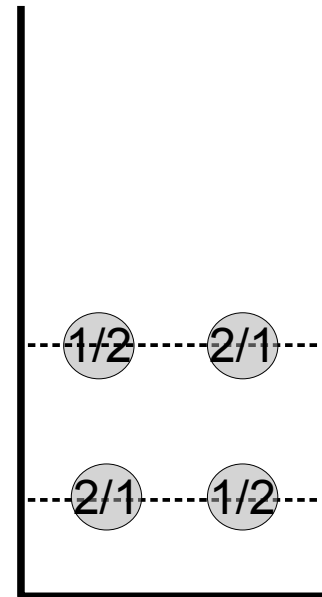
$$\psi^A(x_1, x_2) = -\psi^A(x_2, x_1) \quad \text{antisymmetrisch}$$

bei Teilchenaustausch

bemerkenswert: $\psi_{n,n}^A(x_1, x_2) = 0$

Zwei Teilchen, die durch eine bei Teilchenaustausch asymmetrische Wellenfunktion beschrieben werden, können nicht im gleichen Zustand sein !

Pauli-Prinzip !



Tatsächlich gibt es in der Natur zwei Sorten Teilchen:

Bosonen haben symmetrische Wellenfunktionen

z.B. Photon, manche Atomkerne

Fermionen haben asymmetrische Wellenfunktionen,
d.h. für sie gilt das Pauli-Prinzip

z.B. Elektron, Proton, Neutron, manche Atomkerne, Quarks, ...

Anmerkung: hängt vom „Spin“ (= Eigendrehimpuls) der Teilchen ab
ganzzahlig: 0, 1, 2, ... → Boson
halbzahlig: $\frac{1}{2}$, $1\frac{1}{2}$, $2\frac{1}{2}$... → Fermion

Das **Pauli-Prinzip** – oder besser:

die **unter Teilchenaustausch antisymmetrische Wellenfunktion**

hat wichtige Konsequenzen in Vielteilchensystemen

(→ später)

Simulation

Herausforderungen

THOMPSON RIVERS UNIVERSITY

University of St Andrews

QuVis

Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf

$E_5 = 25E_1$

$E_4 = 16E_1$

$E_3 = 9E_1$

$E_2 = 4E_1$

E_1

Grundzustand

Spin rauf Spin runter

Fermionen

Links siehst Du die Energieniveaus eines unendlich hohen Potentialtopfs. Du kannst Teilchen auf die einzelnen Niveaus verteilen, wobei du jeweils die Anzahl der Teilchen und deren Art (Boson oder Fermion) einstellen kannst. Wenn alle Teilchen verteilt sind, wird Dir rechts die zugehörige Gesamtenergie des Zustands angezeigt; links siehst Du zusätzlich, den wievielten Anregungszustand (bis zum sechsten) Du eingestellt hast.

Energie des Systems

$E_{\text{System}} = 2E_1 + 2E_2 + 2E_3 + 2E_4 + 0E_5$

$= 60E_1$

Verteilung zurücksetzen

Art und Anzahl der Teilchen

☐ Identische Bosonen (Spin 0)
 ☒ Identische Fermionen (Spin $\frac{1}{2}$)

N = 3 4 5 6 7 8

<https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/de/simulations/sims/particles-infwell-de/particles-infwell-de.html>

Ende VL08

und Zeit für Fragen ?