Skript zur 7. Vorlesung "Quantenmechanik", Montag den 9. Mai, 2011.

6.2 Wellenpaket für freies Teilchen

Da sie nicht normierbar sind, stellen die Impuls-Eigenzustände keine physikalischen Zustände dar!
Normierte Zustände eines freien Teilchens (aber keine stationären Zustände!): kontinuierliche Superposition oder Wellenpaket

$$\psi(x) = \int dk \phi(k) \psi_k(x),$$

wobei

$$\psi_k(x) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}.$$

Die Funktion $\psi(x)$ ist quadratintegrabel wenn die Funktion ϕ quadratintegrabel ist,

$$||\psi|| = ||\phi||.$$

Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion ψ findet man aus der Beobachtung, dass die Funktionen $\psi_k(x)$ Eigenfunktionen des Hamiltonoperators sind, so dass ihre Zeitabhängigkeit durch Multiplikation mit dem Phasenfaktor $e^{-iE_k t/\hbar}$ gegeben wird:

$$\psi(x,t) = \int dk \phi(k) \psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

wobei

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2.$$

Beispiel: Gaußsches Wellenpaket,

$$\phi(k) = \frac{1}{(2\pi\sigma_k^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}\right),$$

mit σ_k und k_0 Konstanten. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Impulses und des Ortes sind dann:

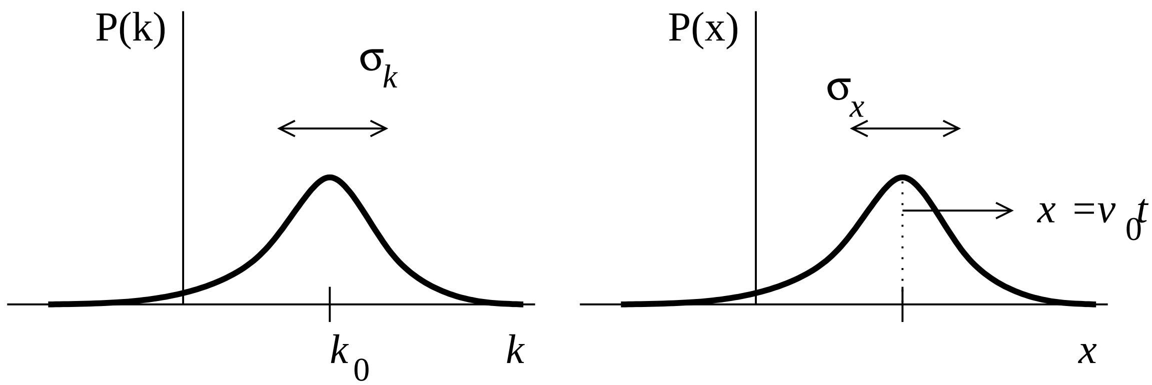
$$
\begin{aligned}
P(k) &= |\phi(k)|^2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}\right), \\
P(x,t) &= |\psi(x,t)|^2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{(x-v_0 t)^2}{2\sigma_x^2}\right),
\end{aligned}
$$

wobei

$$v_0 = \left.\frac{dE_k}{\hbar dk}\right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

und

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\sigma_k^2.$$



Details der Berechnung:

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \int dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi\sigma_k^2)^{1/4}} e^{-(k-k_0)^2/4\sigma_k^2 + ikx + i\hbar k^2 t/2m} \\
&= \left(\frac{2\sigma_k^2}{m}\right)^{1/4} \frac{e^{-\sigma_k^2(x-\hbar k_0 t/m)^2/(1+4\hbar^2\sigma_k^4 t^2/m^2)}}{\sqrt{1+2i\hbar\sigma_k^2 t/m}} e^{i(k_0 x + 2\sigma_k^2 x^2 \hbar t/m - k_0^2 \hbar t/2m)/(1+4\hbar^2\sigma_k^4 t^2/m^2)}.
\end{aligned}
$$

Der letzte Faktor fällt bei der Berechnung von $|\psi(x,t)|^2$ weg.

Das Gaussche Wellenpaket (und auch das allgemeine Wellenpaket, siehe unten) ist der quantenmechanische Zustand, der einer klassischen Beschreibung eines freien Teilches am nächsten kommt. In diesem Zustand wird das Teilchen sowohl durch ein Ort x als auch durch den Impuls p beschrieben. Allerdings sind sowohl x als p nicht scharf: Die Abweichungen sind σ_x bzw. $\hbar\sigma_k$. Es gilt

$$\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2,$$

wobei Gleichheit nur zum Zeitpunkt $t = 0$ auftritt.

Allgemeines Wellenpaket: Die Funktion $\phi(k)$ ist so gewählt, dass $|\phi(k)|$ ein scharfes Maximum bei $k = k_0$ hat.

$$\psi_{\rightarrow}(x,t) = \int dk\, \phi(k) \psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t},$$

wobei $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$. Man schreibt $\phi(k) = |\phi(k)|\, e^{i\alpha(k)}$ und $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$.

Stationäre Phase Argument: Das Integral ist wesentlich $\neq 0$ nur wenn die Phase des Integrands nicht schnell mit k variiert bei $k = k_0$, d.h. nur wenn

$$\left.\frac{d\alpha}{dk}\right|_{k_0} - \left.\frac{t}{\hbar}\frac{dE_k}{dk}\right|_{k_0} + x = 0.$$

$\Rightarrow$ Integral ist $\neq 0$ nur wenn,

$$x = x_0 + v_0 t,$$

wobei

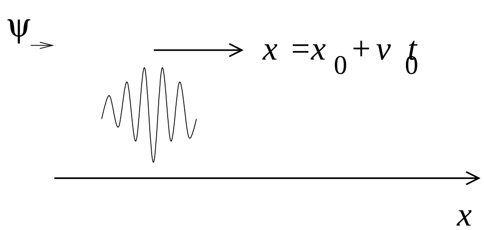
$$x_0 = \left.\frac{d\alpha}{dk}\right|_{k_0} \quad \text{und} \quad v_0 = \left.\frac{1}{\hbar}\frac{dE_k}{dk}\right|_{k_0}.$$

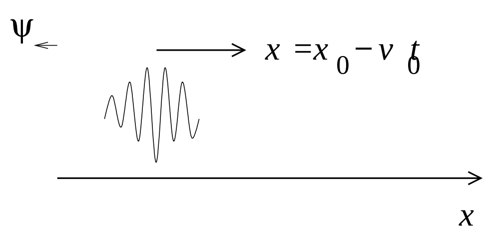
Bemerkung: v_0 ist die “Gruppengeschwindigkeit” aus der Wellentheorie.

In der gleichen Weise führt man

$$\psi_{\leftarrow}(x,t) = \int dk\, \phi^*(k) \psi_{-k}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$$

ein.



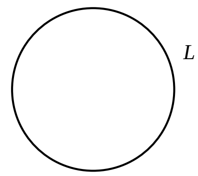


6.3 Periodische Randbedingungen

Periodische Randbedingungen sind ein Trick, um ein diskretes Spektrum (mit normierten stationären Zuständen) zu erreichen: Man fordert, dass die Wellenfunktion der Bedingung

$$\psi(x) = \psi(x+L)$$

genügt. Anders gesagt: Das Teilchen bewegt sich auf einem Ring mit Länge L.



- Skalarprodukt: $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_0^L dx\, \psi_1^*(x)\psi_2(x)$
- Normierte $\hat{p}$-Eigenfunktionen: $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$ mit $p = \frac{2\pi\hbar n}{L}$, $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$.

  (Die Quantisierung des Impulses folgt aus der Bedingung $\psi_p(x) = \psi_p(x+L)$, so dass $e^{-\frac{i}{\hbar}pL} = 1$.)

  Normierung: $\langle p|p'\rangle = \delta_{pp'}$.

  Vollständigkeit: $\sum_p |p\rangle\langle p| = \hat{1}$.

  Energie-Eigenwert $E_p = \frac{p^2}{2m}$.
- Für $L \to \infty$ liegen die Impulswerte sehr nah beieinander.
- Statt $\psi_p(x)$ nimmt man auch $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ mit $k = \frac{2\pi n}{L}, n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$

6.4 Stückweise konstantes Potential: allgemeine Bemerkungen

Wir betrachten nun ein Teilchen mit Hamilton Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),$$

wobei das Potential V stückweise konstant ist.
Um Energie-Eigenwerte und Eigenzustände zu finden, muss die Schrödinger Gleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi(x) = E\psi(x)$$

gelöst werden.

Bemerkungen:

- Wenn $V(x) \geq V_0$ für alle x, dann auch $E \geq V_0$

  Beweis: Für jede normierte Wellenfunktion $\psi(x)$ gilt

$$\begin{aligned}
\langle\psi|H|\psi\rangle &= \langle\psi|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle + \langle\psi|V(\hat{x})|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\langle\hat{p}\psi|\hat{p}\psi\rangle + \int dx\, V(x)\,|\psi(x)|^2 \\
&\geq \frac{1}{2m}\,\|\hat{p}\psi\|^2 + V_0 \\
&\geq V_0
\end{aligned}$$

  Diskrete Eigenwerte $E < V_0$ sind dann ausgeschlossen, weil

$$\langle\psi_E|H|\psi_E\rangle = E\langle\psi_E|\psi_E\rangle = E$$

  wo $|\psi_E\rangle$ der zugehörige normierte Eigenzustand ist. Kontinuierliche Eigenwerte $E < V_0$ sind auch ausgeschlossen, weil man aus den zugehörige δ-Funktion-normierten Eigenzuständen eine kontinuierliche, normierte Superposition bilden kann, für die man dann $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle < V_0$ finden würde.

- Wenn $V(x) = V(-x)$, dann

$$\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = \hat{0}$$

  mit $\hat{P}$ Paritätsoperator,

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$$

  Dann können $\hat{H}$-Eigenzustände auch als $\hat{P}$-Eigenzustände gewählt werden, d.h. man kann $\hat{H}$-Eigenzustände entweder gerade oder ungerade wählen.

- Bei einer Diskontinuität des Potentials V: ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ stetig: Anschlussbedingungen.