

1.8 One dimensional harmonic oscillator

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad \text{energy eigenvalues}$$

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\beta x^2} H_n(\underbrace{\sqrt{2\beta}}_{\xi} x)$$

$$\beta = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

Hermite polynomials

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

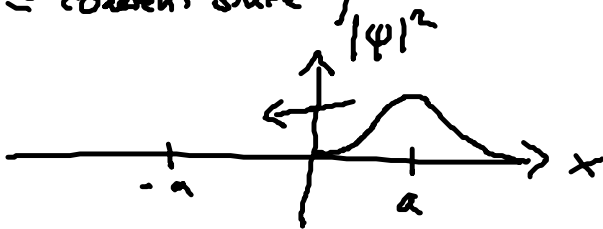
(orthogonal polynomials of degree n)

coherent states of harmonic oscillator (Glauber)

general solution (non stationary): $\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\hbar E_n t} \psi_n(x)$

Special initial conditions: ground state displaced by a

=> Gauß'schen wave packet (no energy eigenstate, but fixed phase
 $\hat{=}$ coherent state)



1.9 Eigenschaften eindim. stationärer Zustände

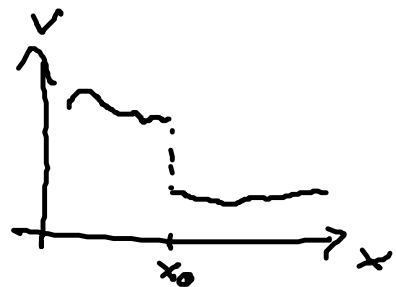
(1) Stetigkeitsbedingungen

stückweise stetiges Potential

=> $\psi(x)$, $\psi'(x)$ stetig

Ein dimensionale, zeitunabh. Schrödingergl.

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



Wäre $\psi' \sim \Theta(x-x_0)$ unstetig bei $x=x_0$, dann $\psi'' \sim \delta(x-x_0)$
 aber R.S. der Schrödinger gl. ist beschränkt \Downarrow

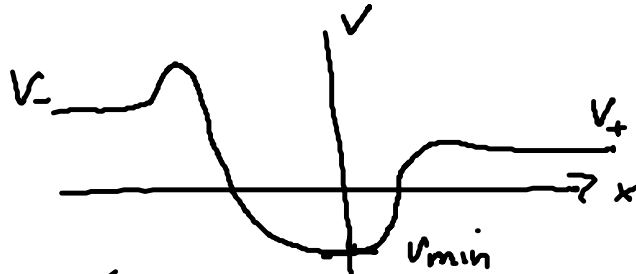
Heaviside Funktion $\Theta(x-x_0) = \begin{cases} 1 & x \geq x_0 \\ 0 & x < x_0 \end{cases}$
 (Ausnahme: Hat $V(x)$ bei $x=x_0$ einen unendlichen Sprung)
 so ist ψ' nicht zwingend stetig \Rightarrow Bsp δ -Potential
 Oft zweckmäßig: Stetigkeit der logarith. Ableitung

$$\left. \frac{d}{dx} \ln \psi \right|_{x_0} = \frac{\psi'(x_0)}{\psi(x_0)} \text{ verwenden.}$$

(2) Charakterisierung des Energiepektrums

stückweise stetig, nach unten beschränktes Pot. mit

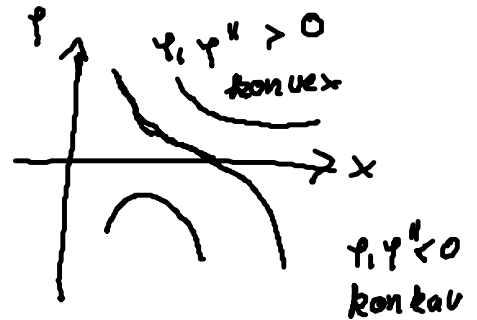
$$V_+ \leq V_- \leq \infty$$



$$\frac{E < V(x)}{\text{(klass. verboten)}} : \frac{\psi''}{\psi} = \frac{\Delta V}{\hbar^2} (V(x) - E) > 0$$

Falls V stetig
 $\psi'' = k^2 \psi \quad k^2 \in \mathbb{R}$

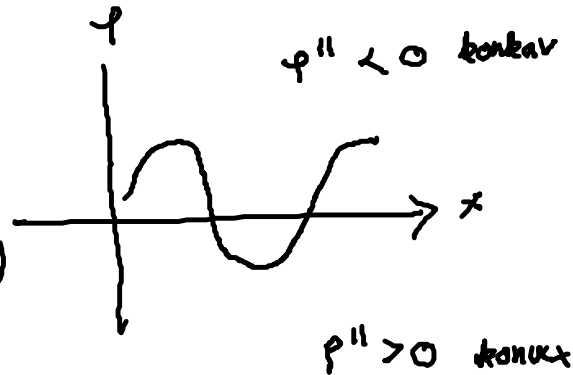
Krümmung weg
 von der x -Achse
 (i.a. "divergent")



$$\frac{E > V(x)}{\text{(klassisch erlaubt)}}$$

Falls V stetig
 $\psi'' = -k^2 \psi \quad k^2 \in \mathbb{R}$

$\frac{\psi''}{\psi} < 0$
 Krümmung stets
 zur x -Achse
 ("oszillierend")



(a) $E < V_{min}$

$E < V(x)$ stets $\Rightarrow \psi(x)$ divergiert in ∞
 keine Lösung!

(b) $V_{\min} < E < V_+$ gebundene Zustände

- diskretes, nicht entartetes Spektrum $E_0 < E_1 < \dots$
 (Entartetes Spektrum heißt: zu einem Eigenwert gehören mehrere lin. unabhängige Eigenfunktionen)

- Die zum n-ten Eigenwert E_n gehörende Eigenfunktion ψ_n hat n Knoten
 (= Nullstellen im Inneren des Def. Bereiches)

Beweis des Knotensatzes

zu jedem E existiert genau eine Lösung $\psi_E(x)$ (i.a. kein Eigenzustand!) von $\psi_E'' - \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi_E$ (1)

mit $\psi_E(-\infty) \rightarrow 0$ (Bildet Linearkombi von 2 linear unabh. Lsg.)

i.a. ist dann aber $\psi(+\infty) \neq 0$

Verschieben E so, dass auch $\psi(+\infty) = 0 \Rightarrow$ spezielle, diskrete Eigenwerte

Beh. Zwischen 2 Eigenwerten muss ein weiterer Knoten vom Inneren am Rand wandern.

Beweis der Beh.

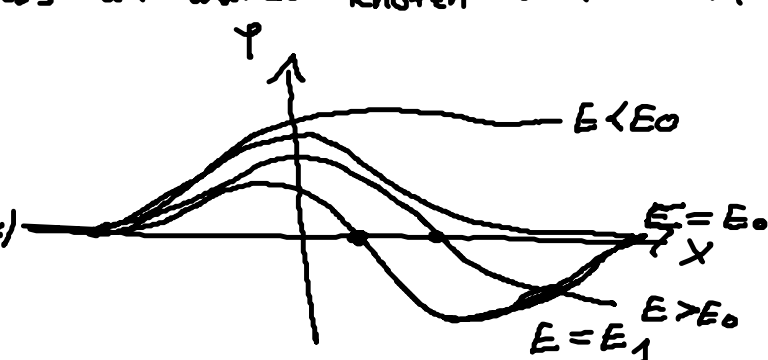
Sei $x_0(E)$ eine Nullstelle von $\psi_E(x)$

Definieren $z(x) := \frac{\partial \psi_E}{\partial E}$

$$\int_{-\infty}^{x_0} (\psi_E'' z - \psi_E z'') dx \stackrel{\text{part. Int.}}{=} \psi_E' z - \psi_E z' \Big|_{-\infty}^{x_0} - \int_{-\infty}^{x_0} \psi_E' z' - \psi_E' z' dx$$

$$= \psi_E'(x_0) z(x_0) - \underbrace{\psi_E(x_0)}_{=0} z'(x_0) - \underbrace{\psi_E'(-\infty)}_{=0} z(-\infty) + \underbrace{\psi_E(-\infty)}_{=0} z'(-\infty)$$

$$\psi_E'(x_0) z(x_0) = \int_{-\infty}^{x_0} (\psi_E'' z - \psi_E z'') dx \quad (2)$$



Aus (1) folgt durch $\frac{\partial}{\partial E}$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} (V-E)\psi - \frac{2m}{\hbar^2} \psi_E \quad (3)$$

Einsetzen von (1) und (3) in (2)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi_E'(x_0) \psi(x_0) &= \int_{-\infty}^{x_0} \overbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E) \psi_E}^{\psi_E''} \psi - \psi_E \overbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} (V-E) \psi - \frac{2m}{\hbar^2} \psi_E \right)}^{\psi_E''} dx \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{x_0} \psi_E^2 dx > 0 \quad (4) \end{aligned}$$

Mit

$$0 = \frac{d}{dE} \psi_E(x_0) = \underbrace{\frac{\partial \psi_E(x_0)}{\partial E}}_{\psi} + \psi_E'(x_0) \frac{dx_0}{dE} \quad \text{folgt}$$

$$\frac{dx_0}{dE} = - \frac{\psi(x_0)}{\psi_E'(x_0)} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{mit (4)}}}{=} - \psi(x_0)^2 \left[\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{x_0} \psi_E^2 dx \right]^{-1} < 0$$

Also wandern die Nullstellen mit abnehmender Energie nach rechts.
Bei jedem Eigenwert verschwindet eine Nullstelle bei ∞ .

Für $E = V_{\min}$ hat $\psi_E(x)$ keine endlichen Nullstellen mehr

Sonst wäre für $-\infty < x_0(E) < \infty$

$$\int_{-\infty}^{x_0} \psi_E'' \psi_E dx \stackrel{\text{part.}}{=} - \int_{-\infty}^{x_0} (\psi_E')^2 dx \stackrel{(1)}{=} \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(V-E)}_{>0} \int_{-\infty}^{x_0} \psi_E^2 dx > 0 \quad \square$$

- Für sym. Potential ($V(x) = V(-x)$)

sind die Eigenfunktionen abwechselnd

Symmetrisch
(gerade Parität
 $\psi(x) = \psi(-x)$)

und

antisymmetrisch
(ungerade Parität
 $\psi(x) = -\psi(-x)$)

(c) $V_+ < E < V_-$



$\frac{\psi''}{\psi} > 0$
 asymptot. Lösung
 $\psi(x) \sim e^{\pm Mx}$
 $M^2 = (V_- - E) \frac{2m}{\hbar^2}$
aber e^{+Mx} divergiert

$\frac{\psi''}{\psi} < 0$
 asymptot.:
 $\psi(x) \sim e^{\pm ikx}$
 $k^2 = (E - V_+) \frac{2m}{\hbar^2}$

(d) $E > V_-$

Kontinuum von Streuzuständen,
 2-fach entartet (Welle läuft von links
 oder rechts ein)

2. Formalisierung der Quantenmechanik

2.1. Zustandsvektoren im Hilbert-Raum

$\psi(\underline{r})$ sei eine Wellenfkt. in Ortsdarstellung

(stationäre
 oder zeitabhängige)
 Argument \underline{r}
 unter drückt

Fourier-Transformation (3-dim):

$$\psi(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \phi(\underline{k}) e^{i\underline{k}\underline{r}}$$

Umkehrung

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 r \psi(\underline{r}) e^{-i \underline{k}' \cdot \underline{r}} = \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \phi(\underline{k})}_{(2\pi)^3 \delta(\underline{k} - \underline{k}')} \underbrace{\int d^3 r e^{i(\underline{k} - \underline{k}') \cdot \underline{r}}}_{(2\pi)^{3/2} \phi(\underline{k}')}$$

Mit $\underline{p} = \hbar \underline{k}$, $\tilde{\psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2} \phi(\underline{k})$:

$$\psi(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \tilde{\psi}(\underline{p}) e^{i/\hbar \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

$$\tilde{\psi}(\underline{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r \psi(\underline{r}) e^{-i/\hbar \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

Ortsdarstellung

↕
umkehrbar
äquivalent

Impulsdarstellung