Zusammenfassung 26.5

Der Harmonischer Oszillator (1d)

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2$$

Zu lösen: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Abstieg, aufstieg Operatoren:

$$\hat{a} = \frac{\omega m\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \qquad \hat{a}^+ = \frac{\omega m\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \qquad \text{da } \left[\hat{P},\hat{X}\right] = \frac{\hbar}{i} \text{ gilt } \left[\hat{a},\hat{a}^+\right] = 1$$

Invertierung,

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(\hat{a}+\hat{a}^+) \qquad \hat{P} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\omega m\hbar}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^+)$$

so dass:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$$

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$$

Ist Hermitesch und heißt Besetzungszahloperator

Eigenvektoren von $\hat{n}$ bilden VONS. $\hat{n}\,|\psi_\nu\rangle = \nu\,|\psi_\nu\rangle \qquad \nu \geq 0$

Grundzustand:

$$\hat{n}\,|\psi_0\rangle = 0, \qquad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-x^2/2x_0^2} \qquad x_0 = \sqrt{\hbar/2m}$$

Angeregte Zustände.

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n |\psi_0\rangle, \qquad \hat{n}\,|\psi_n\rangle = n\,|\psi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\,|\psi_n\rangle = \hbar\omega(n+1/2)|\psi_n\rangle, \quad n = 1, 2, \cdots \infty$$

Bem: 1) $\langle x|\psi_n\rangle = \psi_n(x)$ bildet VONS von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

2) Ortsraumdarstellung von $\psi_n(x)$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n x_0 \sqrt{\pi}}}\, e^{-x^2/2x_0^2}\; H_n(x/x_0)$$

$H_0(x) = 1,\; H_1(x) = 2x,\; H_2(x) = 4x^2 - 2,\; \ldots.$ Hermite Polynome

3) $|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+|\psi_{n-1}\rangle, \quad |\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}\;|\psi_n\rangle, \qquad \hat{a}\;|\psi_0\rangle = 0$

4) Ehrenfest Theorem.

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{X}\rangle(t) = -m\omega^2\langle\hat{X}\rangle(t) \quad \Rightarrow \langle\hat{X}\rangle(t) = A\cos(\omega t + \delta)$$

Wie beim klassischen Fall.

Frage : Für welche Zuständen gilt $\left\langle \hat{X} \right\rangle(t) = A\cos(\omega t + \delta)$?

Antwort: Kohärente Zustände:

$$\left|\psi_\alpha\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left|\psi_n\right\rangle, \qquad \left\langle\psi_\alpha\middle|\psi_\alpha\right\rangle = 1, \quad \hat{a}\left|\psi_\alpha\right\rangle = \alpha\left|\psi_\alpha\right\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

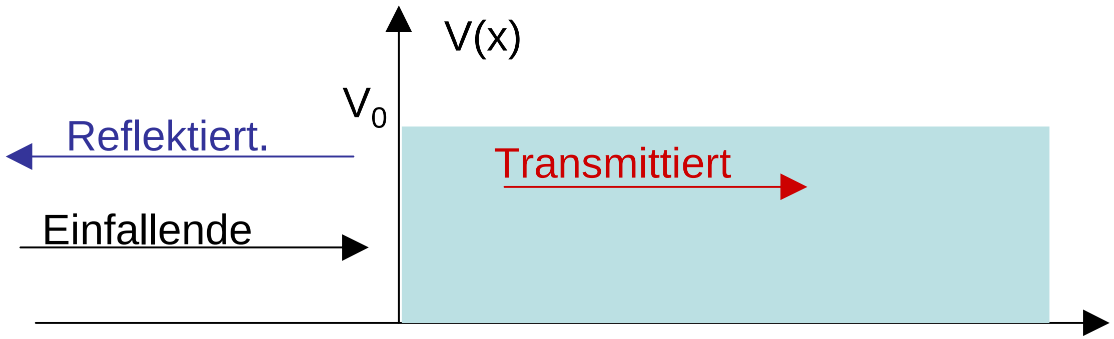
$$\left|\psi_\alpha(t)\right\rangle = e^{-i\omega t/2}\left|\psi_{\alpha(t)}\right\rangle, \qquad \alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$$

$$\left\langle \hat{X} \right\rangle(t) = \left\langle\psi_\alpha(t)\right|\hat{X}\left|\psi_\alpha(t)\right\rangle = \sqrt{2}x_0\,|\alpha|\cos(\omega t + \delta),$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}, \qquad \alpha = |\alpha|\,e^{i\delta}$$

Note: Photons are described by a Hamiltonian which has the same structure as that of the harmonic oscillator. To generate a classical electro-magnetic wave starting from quantum mechanics, (i.e. photons), coherent states are very useful!

Potential-Stufe.



Zu lösen: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$ Stationäre Schrödinger Gleichung.

Bedingungen $$|V(x)|,\ |\psi(x)|,\ |E| < \infty \quad => \quad \psi(x),\ \frac{d}{dx}\psi(x) \ \text{sind stetig}$$

Ansatz.

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R\,e^{-ikx}, & x<0, \qquad k=\sqrt{2mE}/\hbar \\ Te^{iqx}, & x>0, \qquad q=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \end{cases}$$

Lösung.

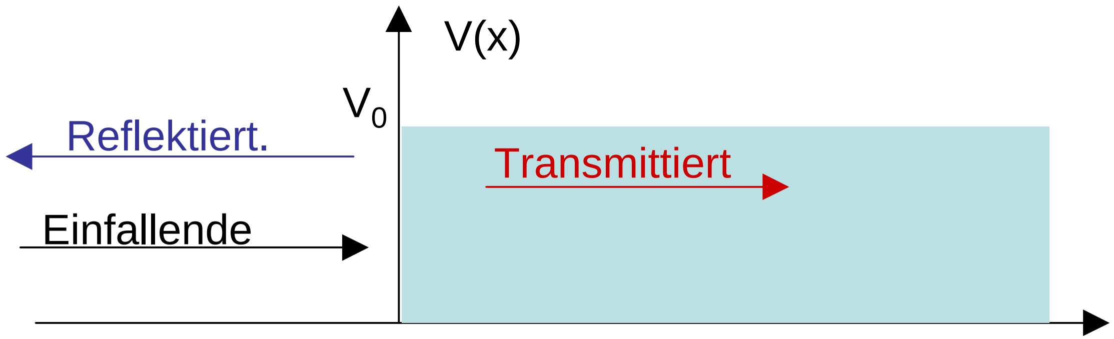
$$R=\frac{k-q}{k+q} = \frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-V_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}}, \quad T=\frac{2k}{k+q}=\frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}}$$

Bemerkung.

$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{|\psi(x,t)|^2}_{=\rho(x,t)} + \nabla\left[\underbrace{\frac{i\hbar}{2m}\left\{(\nabla\psi(x,t))^*\psi(x,t)-\psi(x,t)^*\nabla\psi(x,t)\right\}}_{=\mathbf{j}(x,t)}\right]=0$$

Stationäre Zustand, ein Dimension => j(x,t) = Wahrscheinlichkeitsstrom = Konstant !

Potential-Stufe.



$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R\, e^{-ikx}, & x<0, \qquad k = \sqrt{2mE}/\hbar \\ T e^{iqx}, & x>0, \qquad q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \end{cases}$$

$$R = \frac{k-q}{k+q} \quad , \quad T = \frac{2k}{k+q}$$

$E > V_0$

$$q \in \mathbb{R}$$

$$j_t / j_0 = \frac{q}{k} |T|^2$$

$$j_r / j_0 = |R|^2$$

$R \in \mathbb{R}$ Keine Phase Verschiebung zwischen einfallende und reflektiert Welle.

QM Teilchen kann reflektiert werden sogar wenn E > V_0

$E < V_0$

$$q = i\kappa, \qquad \kappa \in \mathbb{R}$$

Wellenfunktion x>0 ist exponentiell unterdrückt.

$$j_t = 0$$

$$j_r / j_0 = |R|^2 = 1$$

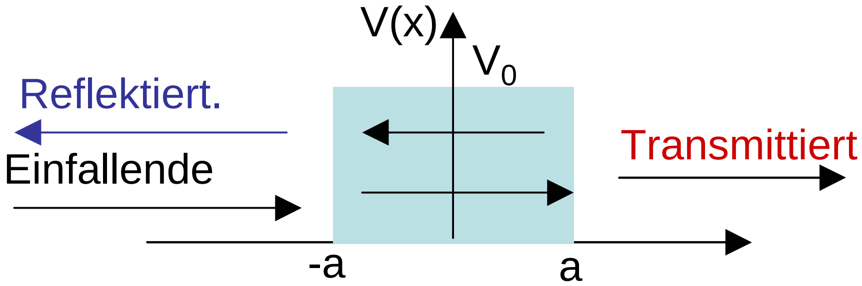
Total-Reflektion.

$$R \in \mathbb{C}$$

$$R = e^{-2i\delta} \qquad \delta = \arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right)$$

Phaseverschiebung.

Tunnel Effekt.



$$E < V_0$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} & x < -a \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a \\ T e^{-ik(x-a)} & x > a \end{cases}$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar = i\kappa$$

Stetigkeit von $\psi(x),\ \psi'(x)$

Transmissionswahrscheinlichkeitsamplitude.

$$T(E)/A(E) = \quad S(E) = \frac{2ik\kappa}{2ik\kappa\cosh(2\kappa a) + (k^2 - \kappa^2)\sinh(2\kappa a)} \neq 0$$

Teilchen befindet sich für Zeitskala Δt im potential Barriere. Während dieser Zeitskala ist

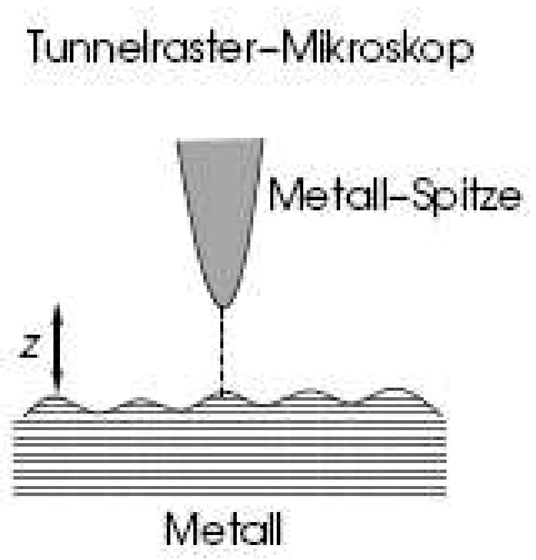
$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\ \Delta t}$$

Scanning tunneling Microscope. STM.

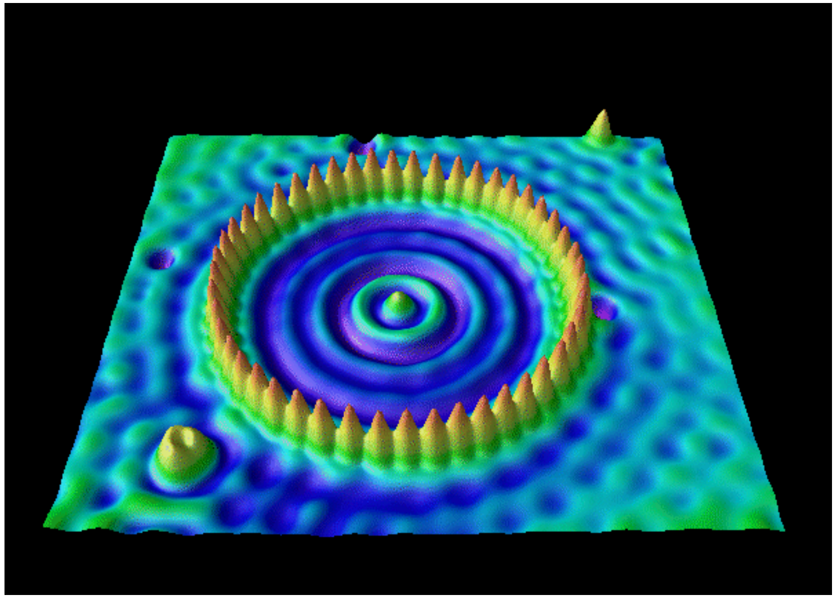
Tunnel Barriere groß: =>

$$|S(E)|^2 \approx 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)e^{-4\kappa a}$$

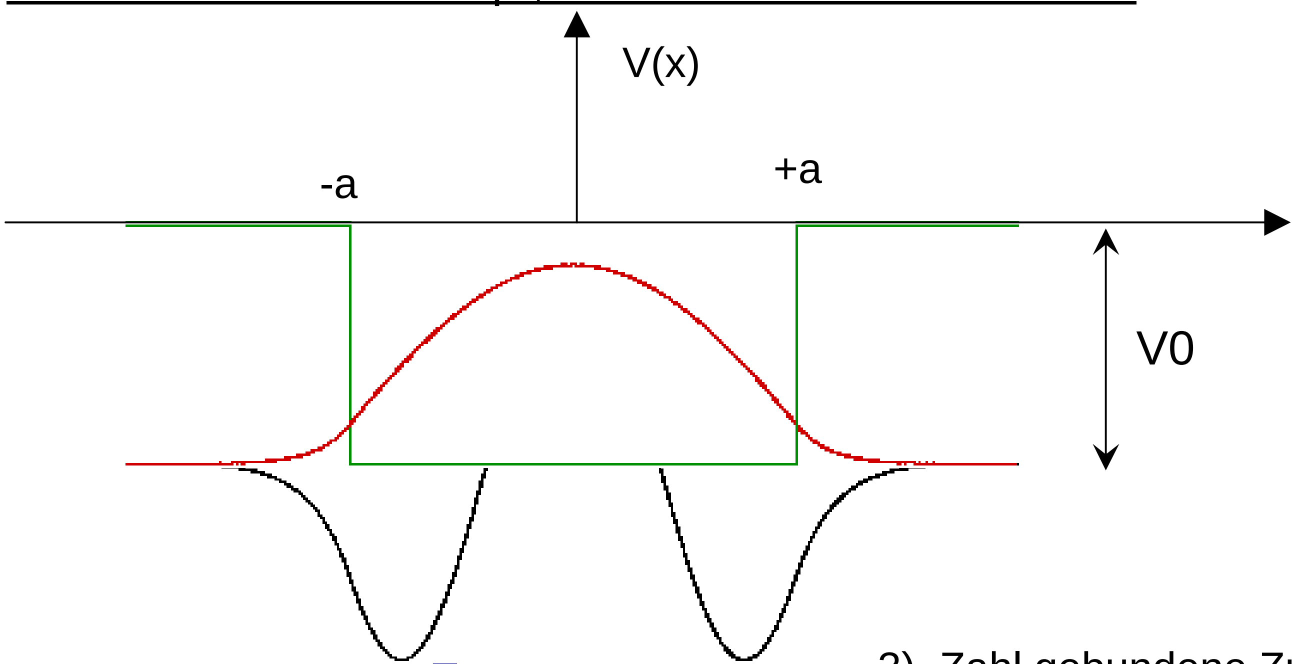
Starke Abhängigkeit von a.

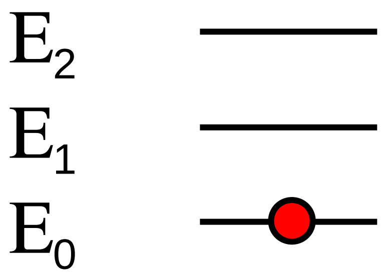


Eisen auf Kupfer Oberfläche.



Teilchen im Potentialtopf, Gebundene Zustände E<0.





1) Grundzustand hat keine Knotenpunkt.

2) Mit aufsteigender Energie nimmt Anzahl von Knotenpunkten zu.

3) Zahl gebundene Zuständen hängt von breite und tiefe des Potentialstopf.

4) Es gibt immer einen gebundene Zustand.

Lösung Vereinfacht durch Symmetrie Betrachtungen. Parität.

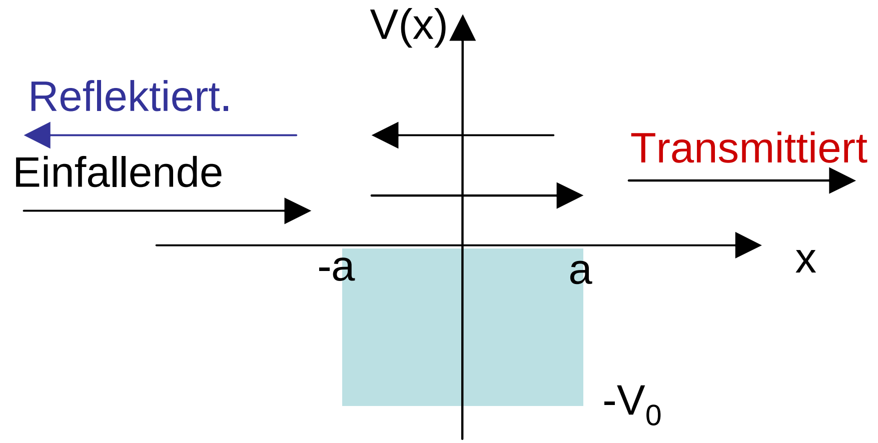
$$\hat{\mathrm{P}}|x\rangle = |-x\rangle, \quad \hat{\mathrm{P}}|p\rangle = |-p\rangle$$

$$\hat{\mathrm{P}}^{+} = \hat{\mathrm{P}}, \quad \hat{\mathrm{P}}^{2} = 1, \quad \hat{\mathrm{P}}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle \Rightarrow \xi = \pm 1, \qquad \hat{\mathrm{P}}\hat{X}\hat{\mathrm{P}} = -\hat{X}, \quad \hat{\mathrm{P}}\hat{P}\hat{\mathrm{P}} = -\hat{P}$$

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

Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Parität sein.

Zusammenfassung 9.6   Teilchen im Potentialtopf, Streu Zustände E>0.



$$E < V_0$$

Ansatz.

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} & x < -a \qquad k = \sqrt{2mE}/\hbar \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a \qquad q = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar \\ T e^{-ik(x+a)} & x > a \end{cases}$$

Stetigkeit von $\psi(x),\ \psi'(x)$ => Transmissionswahrscheinlichkeit.

$$|S(E)|^2 = \left|\frac{T(E)}{A(E)}\right|^2 = \left\{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2qa)}{4E(V_0+E)}\right\}^{-1}$$

1) Perfekte Transmission bei:

$2qa = n\pi,\quad n\lambda_q/2 = 2a$

$(\lambda_q = 2\pi/q),\quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 - V_0$

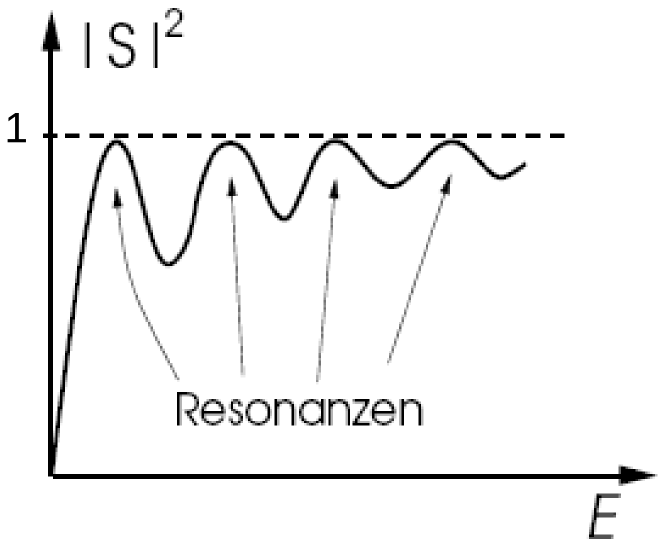
Resonanzen.

2) Beim Resonanz Energie E_n gilt $B(E_n) = 0$

In der nähe des Resonanz gilt:

$$S(E) = \frac{2kq}{2kq\cos(2qa) + i(k^2+q^2)\sin(2qa)} \cong \frac{1}{\cos(n\pi)} \frac{i\Gamma_n/2}{E - E_n + i\Gamma_n/2}$$

$$\text{mit} \quad \frac{1}{\Gamma_n} = \frac{\chi}{4} \frac{1+2E_n/V_0}{\sqrt{E_n/V_0}\left(1+E_n/V_0\right)}, \quad \chi = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$$



$$|S(E)|^2 \cong \frac{(\Gamma_n/2)^2}{(E-E_n)^2 + (\Gamma_n/2)^2}$$

Lorentz Funktion Breite Γ_n

Breite wächst mit zunehmender Energie.

Bedeutung von Breite des Resonanz.

Sei $$\psi_E(x) = \begin{cases} \tilde{A}e^{ikx} + \tilde{B}e^{-ikx} & x < -a \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx} & -a < x < a \\ \tilde{T}e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$ Lösung des Stationär Schr. Gl.

Dann ist: $$\psi(x,t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E)\psi_E(x)$$ Lösung des Zeitabhängig Schr. Gl.

Es gilt:

$$\psi_{Trans}(x,t) = \int dt'\tilde{S}(t-t')\psi_{Ein}(x,t')$$

mit:

$$\psi_{Ein}(x,t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E)\tilde{A}(E)e^{ik(E)x}$$

$$\psi_{Trans}(x,t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E)\tilde{T}(E)e^{ik(E)x}$$

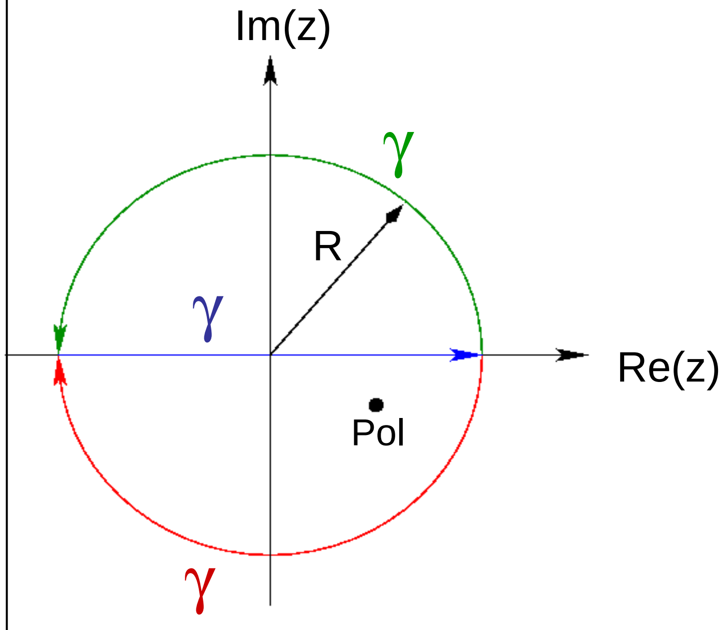
$$\tilde{S}(t-t') = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iE(t-t')/\hbar} \tilde{S}(E)$$

Für $\tilde{S}(E) \cong \dfrac{i\Gamma_n/2}{E - (E_n - i\Gamma_n/2)}$ ist $\tilde{S}(t-t') = \int \dfrac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iE(t-t')/\hbar}\,\tilde{S}(E) =$

$$\lim_{R\to\infty} \frac{i\Gamma_n}{4\pi\hbar} \begin{cases} \oint_{\gamma+\gamma} dz \, \dfrac{e^{-iz(t-t')/\hbar}}{z-(E_n - i\Gamma_n/2)} = 0 & t-t'<0 \\ \oint_{\gamma+\gamma} dz \, \dfrac{e^{-iz(t-t')/\hbar}}{z-(E_n - i\Gamma_n/2)} = 2\pi e^{-iE_n t/\hbar} e^{-\Gamma_n (t-t')/2\hbar} & t-t'>0 \end{cases}$$

$$= \Theta(t-t') \frac{1}{\tau_n} e^{-iE_n t/\hbar} e^{-(t-t')/\tau_n}, \qquad \tau_n = 2\hbar/\Gamma_n$$

1) Kausalität
2) Transmissionssignal überlebt auf Zeitskala τ_n



Zusammenfassung 12.6 **Periodische Potentiale.**

$$\hat{H} = \hat{P}^2/2m + V(\hat{X}) \qquad V(x+na) = V(x) \quad n \in \mathbb{N}$$

Translations Operator.

$$\hat{T}_a = e^{-i\hat{P}a/\hbar} \qquad \hat{P}: \text{ Impuls Operator.}$$

$$\hat{T}_a \left|x\right\rangle = \left|x+a\right\rangle, \qquad \left[\hat{T}_a, \hat{H}\right] = 0$$

Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Translationsoperator sein.

$\hat{T}_a$: Ist unitär. => $\hat{T}_a \left|\psi_k\right\rangle = \lambda_k \left|\psi_k\right\rangle, \quad \left|\lambda_k\right|^2 = 1 \quad => \quad \lambda_k = e^{-ika}$

Im Ortsraum gilt:

$$\left\langle x \middle| \psi_k \right\rangle = \psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x+na) = u_k(x)$$

(Bloch Theorem).

Krönig-Penny Modell.

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

Bem: Anschlussbedingungen für $V(x) = V_0 \delta(x - x_0)$:

$\psi(x)$ stetig. $\lim_{\varepsilon \to 0} \psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 + \varepsilon) = 2mV_0 \psi(x_0)/\hbar^2$

Ansatz zur Lösung stationäre Schr. Gleichung zur Energie E und Translationsoperator Eigenwert exp(-ika):

$$\psi(x) = A_n e^{iqx} + B_n e^{-iqx} \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2mE}/\hbar \;, \quad na \le x < (n+1)a$$

$$\Rightarrow u(x) = e^{-ikx} \psi(x)$$

Forderungen:

1) $u(x+a) = u(x) \quad \Rightarrow \qquad A_n = A_0 e^{-i(q-k)na}, \quad B_n = B_0\, e^{i(q+k)na}$

2) $\lim_{\varepsilon \to 0} \psi(na+\varepsilon) - \psi(na-\varepsilon) = 0 \quad \Rightarrow$

$$\left(1 - e^{i(q-k)a}\right) A_0 + \left(1 - e^{-i(q+k)a}\right) B_0 = 0$$

3) $\lim_{\varepsilon \to 0} \psi'(na+\varepsilon) - \psi'(na-\varepsilon) = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(na) \quad \Rightarrow$

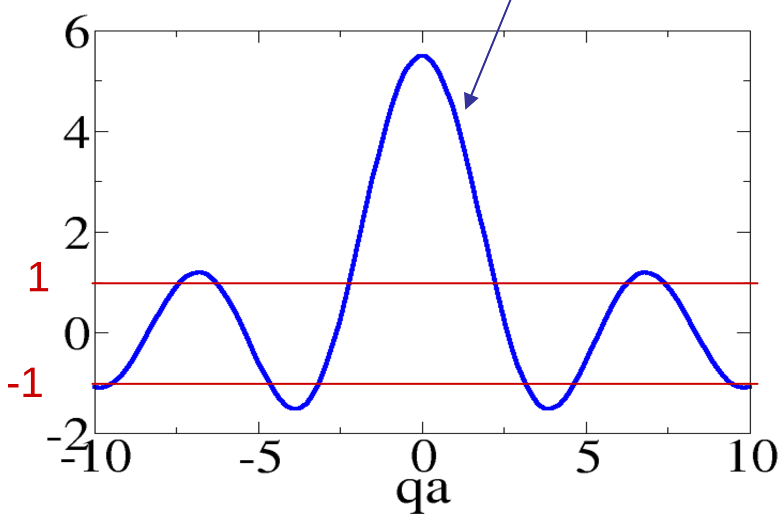
$$\left(iq - iqe^{i(q-k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) A_0 + \left(-iq + iqe^{-i(q+k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) B_0 = 0$$

Nicht Triviale Lösung falls:

$$\det\begin{pmatrix} \left(1-e^{i(q-k)a}\right) & \left(1-e^{-i(q+k)a}\right) \\ \left(iq \ -iqe^{i(q-k)a} \ -\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\right) & \left(-iq+iqe^{-i(q+k)a}-\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\right) \end{pmatrix}=0$$

$$\cos(ka) = \cos(qa)+\frac{2maV_0}{\hbar^2}\frac{\sin(qa)}{qa}$$

Für Gegebenes **k** gibt es nur Diskrete Werte von ***q***



$$E = \hbar^2 q^2 / 2m$$