

Q lässt sich auf ganz \mathcal{H} fortsetzen, und es gilt

$$Q S_{L^2}(\mu, \nu) = S_{L^2}(\mu, \nu) Q$$

In der Tat,

$$Q S(\mu, \nu) \sum c_i \psi_{\alpha_i, \beta_i} =$$

$$= Q \sum e^{i\frac{\hbar}{2}(\mu\beta_i - \nu\alpha_i)} c_i \psi_{\alpha_i + \mu, \beta_i + \nu} = \sum e^{i\frac{\hbar}{2}(\mu\beta_i - \nu\alpha_i)} c_i \psi_{\alpha_i + \mu, \beta_i + \nu}$$

$$= \sum c_i S_{L^2}(\mu, \nu) \psi_{\alpha_i, \beta_i} = S_{L^2}(\mu, \nu) Q \sum c_i \psi_{\alpha_i, \beta_i}$$

⑨ Allgemeiner Fall 1-dimensionaler Bewegung eines Teilchens

Freies Teilchen: kontinuierliches Spektrum

Harmonischer Oszillator: Punktspektrum

Allgemeiner Fall: gemischt (zu erwarten).

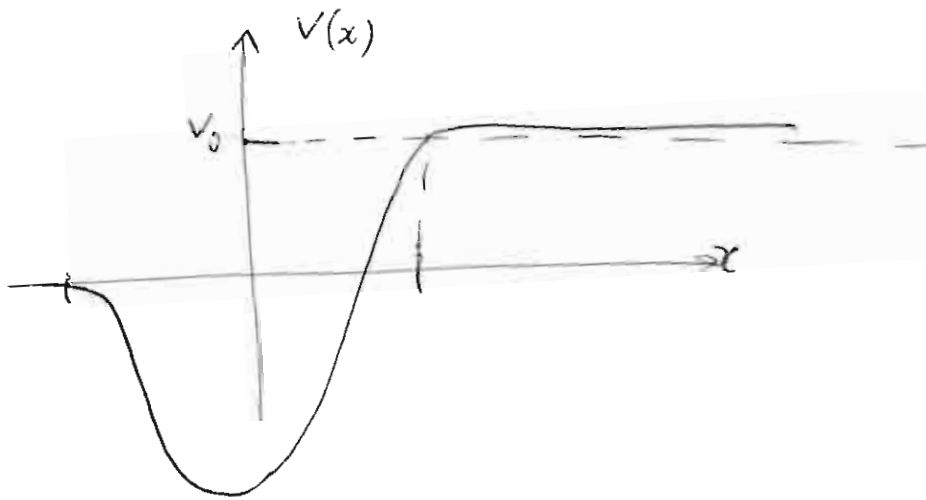
$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Wir diskutieren später das Problem, was die allgemeinen Voraussetzungen (Bedingungen auf V) sind, damit H s.a. ist. Jetzt nehmen wir an, dass $V(x)$ derart ist, dass die (klassischen) Kräfte, die auf Teilchen einwirken, verschwinden als $x \rightarrow \pm\infty$, also $V(x) \approx \text{const} \pm$ als $x \rightarrow \pm\infty$.

OBdA $\text{const}_- = 0$, $\text{const}_+ = V_0$. Einfachheit halber nehmen wir an, dass V einen kompakten „Träger“ hat, im Sinne

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

und ist stetig (oder besser, $\in C^\infty$).



Schrödinger Gleichung $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi \right) \frac{\hbar^2}{2m} = 1$

$$\begin{cases} -\psi'' = E\psi, & x < -a \\ -\psi'' = (E - V_0)\psi, & x > a \end{cases}$$

$\forall E \in \mathbb{R}$ gibt es zwei lin. unabh. Lösungen von

$$-\psi'' = (E - V(x))\psi,$$

wir bezeichnen sie ψ_1, ψ_2 . Dann $\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$.

1) $E < 0$, $E = -\kappa^2$, $E - V_0 = -\kappa_1^2 \Leftrightarrow \kappa_1 = \sqrt{\kappa^2 + V_0} > \kappa$

Für $x < -a$: $\psi = c_1' e^{-\kappa x} + c_2' e^{\kappa x}$

Für $x > a$: $\psi = c_1'' e^{-\kappa_1 x} + c_2'' e^{\kappa_1 x}$

Die Lösung ψ ist beschränkt (und quadratintegrabel) wenn $c_1' = 0$, was eine Bedingung liefert, $\frac{c_1'}{c_2'} = F_1(E)$.

Analog, ist ψ beschränkt (und dann quadratintegrabel) für $x \rightarrow +\infty$, wenn $c_2'' = 0$, d.h. $\frac{c_1''}{c_2''} = F_2(E)$. Also gibt es beschränkte Lösungen (die automatisch zu L^2 gehören), wenn $F_1(E) = F_2(E)$. Dies ist eine algebraische Gleichung die (in allgemeiner Lage) eine diskrete Lösungsmenge besitzt: einfaches Punktspektrum.

2) $0 < E < V_0$, $E = k^2$, $E - V_0 = -\kappa_1^2$, $\kappa_1 = \sqrt{V_0 - k^2} > 0$

Für $x < -a$: $\psi = c_1' e^{ikx} + c_2' e^{-ikx}$

Für $x > a$: $\psi = c_1'' e^{-\kappa_1 x} + c_2'' e^{+\kappa_1 x}$

Keine Lösungen in L^2 , allerdings zu jedem E gibt es eine beschränkte Lösung ($\in C^2(a, +\infty)$), falls $\frac{G_1}{G_2} = F_2(E)$: einfaches kontinuierliches Spektrum.

3) $E > V_0$, $E = k^2$, $E - V_0 = k_1^2$, $k_1 = \sqrt{k^2 - V_0} < k$

Für $x < -a$: $\psi = c_1' e^{-ikx} + c_2' e^{ikx}$

Für $x > a$: $\psi = c_1'' e^{-ik_1 x} + c_2'' e^{ik_1 x}$

alle Lösungen beschränkt, keine $\in C^2$: zweifaches kontinuierliches Spektrum.

VL 17, 04.01.2011

physikalische Deutung:

Lösungen in L^2 : exponentieller Abfall, Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in Region mit großem $|x|$ vorzufinden, exponentiell klein.

Erwartungswert der Energie - Eigenwert.

Beschränkte oszillierende Lösungen (gehören nicht zum Zustandsraum): daraus kann man Lösungen konstruieren von wellenpaket-Typ, interpretiert als Zustände mit der „fast“ vorgeschriebenen Energie.

Die nicht-stationäre Schrödinger-Gleichung zeigt, daß das Teilchen nach $\pm \infty$ geht als $|t| \rightarrow \infty$.

Klassisch: Bewegung beschränkt für $E < V_0$, Teilchen kann $\text{brech } \rightarrow \infty$ sehen für $0 < E < V_0$, und nach $\pm \infty$ für $E > V_0$. Vielfachheit des kontinuierlichen Spektrums entspricht der Anzahl (8)

der Richtungen, in die das Teilchen entweichen kann.

Klassischer Limes von stationären Quantenzuständen.

Zur Erinnerung: die klassische Verteilungsfunktion, die dem Limes des Zustandes P_ψ für $\hbar \rightarrow 0$ entspricht, ist

$$P(p, q) = \int e^{-ipx} F(q, x) dx,$$

und ihre Fourier-Transformierte ist

$$\hat{P}(x, p) = \int e^{i p x} F(x, u) dx,$$

wobei

$$F(x, u) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \psi(x + \hbar u) \overline{\psi(x)}$$

man braucht also asymptotische Methoden zur Lösung von

$$\psi'' + \frac{E - V(x)}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (2m=1)$$

Die WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin)-Methode:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x g(s) ds\right);$$

einsetzen

$$\psi'' = \left(\frac{i}{\hbar} g \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x g(s) ds\right)\right)' = \left(\frac{i}{\hbar} g' + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 g^2\right) \exp(\dots),$$

also

$$\frac{i}{\hbar} g' + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 g^2 + \frac{E - V(x)}{\hbar^2} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow i\hbar g' - g^2 + E - V(x) = 0 \quad (\text{Riccati-Gleichung})$$

$$\text{Ansatz: } g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\hbar}\right)^k g_k(x).$$

Einsetzen:

$$-\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{k+1} g_k' - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^k \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k g_n g_{k-n} + E - V(x) = 0$$

$$\hbar^0: -g_0^2 + E - V(x) = 0$$

$$\hbar^k, k \geq 1: -g_{k-1}' - \sum_{n=0}^k g_n g_{k-n} = 0$$

Also

$$g_0(x) = \pm \sqrt{E - V(x)} = \pm p(x); \quad \left(\begin{array}{l} E \geq V(x): p(x) \text{ - das} \\ \text{klassische Impuls} \\ \text{eines Teilchens im} \\ \text{Potential } V(x) \text{ mit} \\ \text{Energie } E; \text{ im verbotenen} \\ \text{Gebiet } E < V(x): p(x) \text{ imaginär} \end{array} \right)$$

$$g_0' = -2g_0 g_1 \Rightarrow g_1 = -\frac{1}{2} \frac{g_0'}{g_0} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \log |p(x)|$$

Also

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) (1 + O(\hbar))$$

(solange $p(x) \neq 0$). Diese zwei linear unabhängige Lösungen heißen WKB-Lösungen, und die

allgemeine WKB-Wellenfunktion lautet

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left(c_1 e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \right) (1 + O(\hbar))$$

Diese asymptotische Relation ist nur gültig, wenn

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| \ll 1,$$

oder, da $p(x) = (E - V(x))^{1/2}$,

$$\left| \frac{\hbar F}{p^3} \right| \ll 1, \quad \text{wobei } F = -\frac{dV}{dx} \text{ - die klassische Kraft.}$$

Also funktioniert die WKB-Asymptotik nicht, wenn klassischer Impuls p klein ist, d.h. in

der Nähe der klassischen Umkehrpunkten, wo

$$E = V(x) \Leftrightarrow p(x) = 0.$$

Es sei $x = a$ ein Umkehrpunkt mit

$$F(a) = -\frac{dV}{dx}(a) =: F_0 \neq 0, \text{ also } E - V(x) \approx F_0(x-a).$$

In der Nähe von $x = a$ können wir die Schrödinger-Gleichung schreiben als

$$h^2 \psi'' + F_0(x-a) \psi = 0,$$

oder, nach der Transformation der unabhängigen Variablen zu

$$\xi = \left(\frac{F_0}{h^2}\right)^{1/3} (a-x),$$

$$|p(x)| = (F_0(x-a))^{1/2} \\ = \frac{1}{2} \frac{h^2 F_0}{h^2} \xi^{1/2} = \left(\frac{h^2 F_0}{3}\right)^{1/4} \xi^{1/4}$$

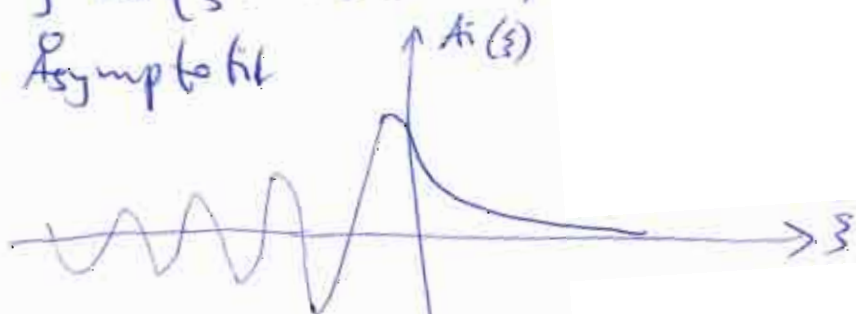
$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = \xi \psi$$

Die beschränkte Lösung dieser Gleichung heißt die Airy-Funktion,

$$Ai(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{1}{3}t^3 + \xi t\right) dt,$$

und besitzt die Asymptotik

$$(Ai(0) = \frac{\sqrt{\pi}}{3^{3/4} \Gamma(3/4)})$$



$$Ai(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2\xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} (1 + O(\xi^{-3/2})), & \xi \rightarrow +\infty \\ \frac{1}{(-\xi)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) (1 + O(|\xi|^{-3/2})), & \xi \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Mit Hilfe dieser Relationen kann man die Formeln finden, die die WKB-Wellenfunktionen im klassischen und im verbotenen Gebiet zusammenführen.

Angenommen, ist $x=a$ ein Umkehrpunkt mit $F_0 > 0$, sodass $x < a$ das verbotene Gebiet ist. Dann ist dort

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(s)| ds}$$

exponentiell fallend für $x \rightarrow -\infty$, während im klassischen Gebiet $x > a$

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(s) ds + \alpha\right).$$

Die WKB-Näherung in der Nähe des Umkehrpunktes bleibt gültig, solange

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar F_0}{(F_0(x-a))^{3/2}} \right) &\ll 1 \Leftrightarrow \left(\frac{\hbar}{F_0^{1/6} (x-a)^{3/2}} \right) \ll 1 \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow |x-a| &\gg \left(\frac{\hbar}{F_0^{1/6}} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^{2/3}}{F_0^{1/3}} = \left(\frac{\hbar^2}{F_0} \right)^{1/3} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow |\xi| &\gg 1 \end{aligned}$$

Andererseits, für $|x-a| \ll 1$ haben wir die Asymptotik $\psi(x) = C \text{Ai}(\xi) (1 + O(\hbar))$.

Wir betrachten die Werte von x , für die beide Bedingungen erfüllt sind:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2}{F_0} \right)^{1/3} &\ll |x-a| \ll 1, \\ \text{oder} \quad 1 &\ll |\xi| \ll \left(\frac{F_0}{\hbar^2} \right)^{1/3} \end{aligned}$$

Für $x < a$ haben wir $|\xi| \gg 1$ und

$$\frac{2}{3} \xi^{3/2} = \frac{2}{3\hbar} \sqrt{F_0} (a-x)^{3/2} \approx \frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(s)| ds$$

$$\xi^{1/4} = \left(\frac{F_0}{\hbar^2} \right)^{1/6} \frac{\sqrt{|p(x)|}}{(F_0)^{1/6}}$$

also

$$\psi(x) = C \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} (hF_0)^{1/6} \exp\left(-\frac{1}{h} \int_x^a |p(s)| ds\right),$$

sodass aus Vergleich mit ψ_{WKB} finden wir

$$\frac{C (hF_0)^{1/6}}{2} = A \Leftrightarrow 2A = C (hF_0)^{1/6}.$$

Analog, für $x > a$ haben wir $\xi \ll -1$ und

$$\frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} = \frac{2}{3h} \sqrt{F_0} (x-a)^{3/2} \simeq \frac{1}{h} \int_a^x p(s) ds,$$

$$(-\xi)^{1/4} = \frac{\sqrt{p(x)}}{(hF_0)^{1/6}}, \text{ also}$$

$$\psi(x) = C \frac{(hF_0)^{1/6}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right),$$

sodass der Vergleich mit ψ_{WKB} liefert

$$B = C (hF_0)^{1/6} = 2A \text{ und } \alpha = \frac{\pi}{4}.$$

$$\psi_{WKB}(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{h} \int_a^x |p(s)| ds\right), & x < a \\ \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right), & x > a \end{cases}$$

Wenn $x = b$ ein Umkehrpunkt mit $F_0 < 0$ ist, sodass $x > b$ verbotenes Gebiet ist, haben wir analog

$$\psi_{WKB}(x) = \begin{cases} \frac{2B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_x^b p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right), & x < b \\ \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{h} \int_x^b |p(s)| ds\right), & x > b \end{cases}$$

Gibt es zwei Umkehrpunkte $a < b$, sodass das klassische Gebiet $a \leq x \leq b$ ist, so fällt ψ_{WKB} exponentiell ab für $x < a$ und für $x > b$, während im klassischen Gebiet oszilliert sie:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$= \frac{2B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$= \frac{2B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(s) ds - \frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(s) ds + \frac{\pi}{2}\right)$$

Das passt nur zusammen, wenn

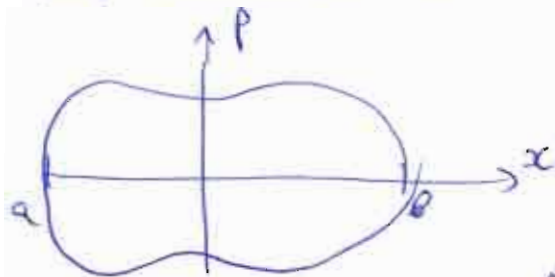
VL 18, 06.01.2011

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(s) ds + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi$$

(und dann $A = (-1)^{n+1} B$). Diese Bedingung lautet

$$\int_a^b \underbrace{\sqrt{E - V(x)}}_{p(x)} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Übrigens, die Bedeutung von n ist die Anzahl der Nullstellen der WKB-Wellenfunktion



$$\oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) -$$

die Bohr-Sommerfeldsche

Quantisierungsregel, liefert

(für große n) die Energieniveaus (Eigenwerte des Schrödingeroperators). Wir haben diese Relationen aus der Bedingung hergeleitet, dass ψ_{WKB} exponentiell für $x \rightarrow \pm\infty$ abfällt.

Klassischer Limes der WKB-Wellenfunktion

$$F(x, u) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \psi(x + \hbar u) \overline{\psi(x)}$$

Im Falle des konstanten Wertes von u folgt $E_u \rightarrow V_0 = \min_x V(x)$, und der Limes ist der stationäre Zustand im Potentialminimum - uninteressant. Interessanter ist der Fall $\hbar \rightarrow 0$, $u \rightarrow \infty$, sodass $E = \text{const}$ (\hbar läuft durch die Folge gegen Null). Dann

$$F(x, u) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{C}{\sqrt{p(x + \hbar u)p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^{x + \hbar u} p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right) \times \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(s) ds + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$= \frac{C}{p(x)} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \left(\cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x + \hbar u} p(s) ds\right) - \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^{x + \hbar u} p(s) ds + \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(s) ds + \frac{\pi}{2}\right) \right)$$

Der Grenzwert des zweiten Summanden in Distributionssinn ist $= 0$, und

$$F(x, u) = \frac{C}{p(x)} \cos(p(x)u) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho(q, p) = \frac{C}{p(q)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipq} \cos(p(q)u) du$$

$$= \frac{C}{p(q)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipq} (e^{ip(q)u} + e^{-ip(q)u}) du$$

$$= \frac{C}{p(q)} [\delta(p - p(q)) + \delta(p + p(q))].$$

Die Dichte ist proportional zum Kehrwert des klassischen Impuls, während der Impuls nimmt einen der beiden Werte $\pm p(q)$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit.