

1.) Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation

a.) Erwartungswerte von Observablen (Mittelwert)

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

woher kommt das ?

Messwert

• klassischer Erwartungswert: $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i a_i \frac{N(a_i)}{N}$

• Erinnerung: 3 Postulat

$$W(a_i) = \frac{\langle \psi | P_{a_i} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Projektion

$$= \sum_i a_i \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(a_i)}{N}$$

Anteil bei N-Messungen

$W(a_i) \leftarrow$ Wahrscheinlichkeit a_i zu messen

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_i a_i \frac{\langle \psi | P_{a_i} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$= \frac{\langle \psi | \sum_i a_i P_{a_i} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \square$$

Beispiel: Ortsdarstellung

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{A} | \psi \rangle dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A}_x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{A}_x |\psi(x)|^2 dx$$

Ortsdarstellung von \hat{A}

b.) Standardabweichung

• Beschreibung der Streuung der gemessenen Werte

$$\Delta A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \leftarrow \text{quadratische Abweichung vom Mittelwert}$$

$$= \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2$$

$$= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$\Rightarrow \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

c.) Unbestimmtheitsrelation

• Wir betrachten $|\varphi\rangle = (A + \lambda i B)|\psi\rangle$

$$A, B: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

• betrachte das positiv definite Skalarprodukt

↑
hermitesch

$$0 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \psi | (A - \lambda i B)(A + \lambda i B) | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^2 + \lambda^2 B^2 + \lambda i [A, B] | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned}
 0 &\leq \langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \Psi | (A - \lambda_i B) (A + \lambda_i B) | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \hat{A}^2 + \lambda^2 B^2 + \lambda i [A, B] | \Psi \rangle \\
 &= \langle A^2 \rangle + \lambda^2 \langle B^2 \rangle + \lambda i \langle [A, B] \rangle
 \end{aligned}$$

Quadratische Gleichung in λ : Ungleichung ist dann erfüllt wenn die Diskriminante ≤ 0 ist

$$\left[a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \right] \Rightarrow b^2 - 4ac \leq 0$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow -\langle [A, B] \rangle^2 - 4 \langle B^2 \rangle \langle A^2 \rangle &\leq 0 \\
 \langle B^2 \rangle \langle A^2 \rangle &\geq -\frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2
 \end{aligned}$$

Transformiere zur Abweichung der Mittelwerte $B' = B - \langle B \rangle$
 $A' = A - \langle A \rangle$

$$\begin{aligned}
 [A', B'] &= [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] \\
 &= [A, B] - [\langle A \rangle, B] - [A, \langle B \rangle] - [\langle A \rangle, \langle B \rangle] \\
 &= [A, B] \quad \underbrace{[\langle A \rangle, B] + [A, \langle B \rangle] + [\langle A \rangle, \langle B \rangle]}_{=0}
 \end{aligned}$$

analog zu obigen Herleitung gilt dann:

$$\langle B'^2 \rangle \langle A'^2 \rangle = \Delta B^2 \Delta A^2 \geq -\frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2 \quad | \sqrt{\dots}$$

$$\boxed{\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|} \quad \text{Unschärfrelation}$$

Beispiele:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}_x] \rangle| = \frac{1}{2} |i\hbar| = \frac{\hbar}{2}$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \quad [\hat{x}, \hat{p}_x^2] = \hat{p}_x [\hat{x}, \hat{p}_x] + [\hat{x}, \hat{p}_x] \hat{p}_x = 2i\hbar \hat{p}_x$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{x} \Delta \hat{T} \geq \frac{1}{4m} |\langle [\hat{x}, \hat{p}_x^2] \rangle| = \frac{\hbar}{2m} |\langle \hat{p}_x \rangle| \quad \text{abhängig vom Impuls}$$

Anwendungen

• Zeit-Energie Unschärfe $\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

↳ natürliche Linienbreite von Spektrallinien
 $\Delta t \sim \tau$ - Lebensdauern

• Warum fällt das e^- nicht in den Atomkern?

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Atomkern nahezu punktförmig} \Rightarrow \Delta x \rightarrow 0 \\
 \Delta p \rightarrow \infty \quad \text{unendlich Energie}$$

• Vakuumfluktuation durch $\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

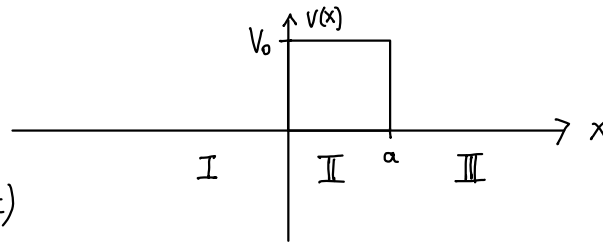
↳ Casimir Effekt
 ↳ virtuelle Teilchen

• Abschätzung der Breite von Tunnelbarrieren $\Delta p = \sqrt{2mV}$ V - Potential

$$\Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{\sqrt{2mV}}$$

$$V = \frac{p^2}{2m}$$

2 Der Potentialwall



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V(x) \Psi(x,t)}_{\text{zeitunabhängiger Hamilton-Operator}}$$

• einfacher Ansatz für die zeitliche Entwicklung der ebenen Welle

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega t} \Psi(x,0) \Rightarrow \text{LHS} \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hbar\omega \Psi(x,t) = E \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow E \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V(x) \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}_{-k^2} \Psi(x,t)$$

Wähle als Lösungsansatz: $\Psi(x,t) = \underbrace{A e^{i(kx - \omega t)}}_{\rightarrow \text{Welle}} + \underbrace{A' e^{i(-kx - \omega t)}}_{\leftarrow \text{Welle}}$

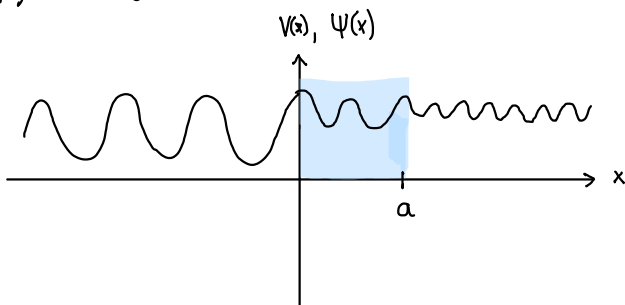
$$\text{es gilt nun } V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & \text{I} \\ V_0 & 0 \leq x \leq a & \text{II} \\ 0 & x > a & \text{III} \end{cases}$$

In den drei Raumbereichen gelte nun:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} & k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \\ \Psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} & k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \\ \Psi_3(x) &= A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x} \end{aligned}$$

Annahme: Teilchen kommt von $-\infty$ in positive Richtung: $A_3' = 0$

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \\ \Psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \\ \Psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} \end{aligned}$$



Fordere nun Stetigkeit an den Grenzflächen

$$\Psi_1(0) \stackrel{!}{=} \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 + A_1' = A_2 + A_2' \quad (1)$$

$$\Psi_1'(0) \stackrel{!}{=} \Psi_2'(0) \Rightarrow k_1 (A_1 - A_1') = k_2 (A_2 - A_2') \quad (2)$$

- Wellenfunktion
- Ableitung der Wellenfunktion

$$\Psi_2(a) \stackrel{!}{=} \Psi_3(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} + A_2' e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \quad (3)$$

$$\Psi_2'(a) \stackrel{!}{=} \Psi_3'(a) \Rightarrow (A_2 e^{ik_2 a} - A_2' e^{-ik_2 a}) k_2 = k_1 A_3 e^{ik_1 a} \quad (4)$$

$$(1) + \frac{1}{k_1} (2) : 2A_1 = A_2 + A_2' + \frac{k_2}{k_1} (A_2 - A_2') \\ A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) A_2 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) A_2' \quad (5)$$

$$(1) - \frac{1}{k_2} (3) : A_1' = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) A_2 + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) A_2' \quad (6)$$

$$(3) + \frac{1}{k_2} (4) : 2A_2 e^{ik_2 a} = \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_1 a} A_3 \\ \Rightarrow A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 \quad (7)$$

$$(3) - \frac{1}{k_2} (4) : \Rightarrow A_2' = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 \quad (8)$$

Drücke nun A_1 und A_1' in Abhängigkeit von A_3 aus

$$(5) + (7), (8) \Rightarrow A_1 = \left(\frac{1}{4} \underbrace{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)}_{2 + \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}} e^{i(k_1 - k_2)a} + \frac{1}{4} \underbrace{\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)}_{2 - \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}} e^{i(k_1 + k_2)a} \right) A_3 \\ = \left(\frac{1}{2} \underbrace{\left(e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}\right)}_{\cos(k_2 a)} - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \frac{1}{2} \underbrace{\left(e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}\right)}_{i \sin(k_2 a)} \right) e^{ik_1 a} A_3$$

$$A_1 = \left(\cos(k_2 a) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} i \sin(k_2 a) \right) e^{ik_1 a} A_3$$

$$(6) + (7), (8) \Rightarrow A_1' = \left(\frac{1}{4} \underbrace{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)}_{\frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1 k_2}} e^{i(k_1 - k_2)a} + \frac{1}{4} \underbrace{\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)}_{\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2}} e^{i(k_1 + k_2)a} \right) A_3 \\ = \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \frac{1}{2} \underbrace{\left(e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}\right)}_{i \sin(k_2 a)} \right) e^{ik_1 a} A_3 \\ = \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} i \sin(k_2 a) e^{ik_1 a} A_3$$

Damit können wir die Transmissionswahrscheinlichkeit berechnen, dass das Teilchen die Barriere durchquert.

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{|e^{-ik_2 a}|^2 = 1}{\left| \cos(k_2 a) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} i \sin(k_2 a) \right|^2} = \frac{1}{\underbrace{\cos^2(k_2 a)}_1 + \underbrace{\frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2(k_2 a)}_{[(\dots) + 1 - 1]}} \\ = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2 - 4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2(k_2 a)} \\ = \frac{4|k_1^2 k_2^2|}{4|k_1^2 k_2^2| + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

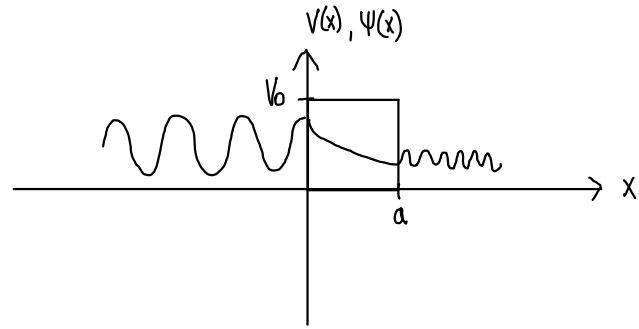
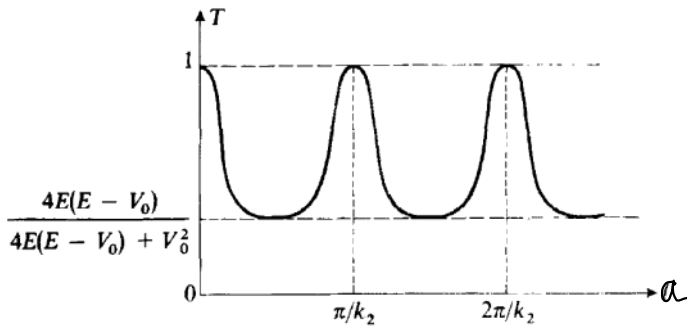
$$T = \frac{4E|E-V_0|}{4E|E-V_0| + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E-V_0)} \frac{a}{\hbar}\right)}$$

Betrachte den Spezialfall $E < V_0$: $2m(E-V_0) < 0 \Rightarrow \sin\left(\sqrt{2m(E-V_0)} \frac{a}{\hbar}\right) = \sinh\left(\sqrt{2m(V_0-E)} \frac{a}{\hbar}\right)$

$$\Rightarrow T = \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{2m(V_0-E)} \frac{a}{\hbar}\right)}$$

Quantenmechanischer Tunneleffekt

Spezialfall $E > V_0$:



Transmission abhängig von der Breite
→ Oszillationen

maximal für $a = n \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V_0)}} \quad n \in \mathbb{N}$