1 Allgemein

1.1 stets im Hinterkopf behalten:

1. die Formeln der Quantenmechanik sind häufig nur erraten
2. *„vieles spricht dafür, dass der Zufall eine fundamentale Rolle in der Natur spielen könnte und dass das Teilchen vor der Ortsmessung gewissermaßen selbst noch nicht weiß, wo es sich materialisieren soll.“*
   $\rightarrow$ hier: **Wahrscheinlichkeitsinterpretation**
3. eine Wellenfunktion muss bei der Wahrscheinlichkeitsinterpretation normiert sein (2)

1.2 Postulate:

1. $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N, t)$ ist unser Zustand/Eigenfunktion des Teichensystem (Anzahl N Teilchen), mit den Ortsvektoren $\vec{r}$
2. **gilt universell:** jede physikalisch messbare Variable besitzt einen hermitischen Operator ($\hat{A}$, $\hat{B}$, ...) (3.3).
   if $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$:
   a) $\hat{A}$ und $\hat{B}$ sind hintereinander bzw. unabhängig voneinander messbar
      $\rightarrow$ d.h. sie besitzen gemeinsame Eigenzustände $|\psi\rangle$
   b) $\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$ und $\hat{B}\,|\psi\rangle = \mu\,|\psi\rangle$
3. nur die Eigenwerte (λ, μ etc.) sind messbar; sie sind reelle Zahlen

1.3 Unterschiede Quantenmechanik (QM) zur Elektrodynamik (ED):

1. ED: **Felder** (z.B. $\vec{B}$) sind die physikalische Rolle:
   a) deren Werte bestimmen an jedem Ort, welche Kraft auf die Ladung q wirkt
2. QM: **Potentiale** sind die physikalische Rolle
   a) z.B. das Vektorpotential A von $\vec{B}$ beeinflusst die Phase einer Quantenwelle

2 Die statistische Quantenwelle ψ

2.1 zum Verständnis:

1. die Wahrscheinlickeitsaussagen sind die Lösung der Schrödinger-Gleichung (2.3)
2. ein e^- hat in einem Atom keine Flugbahn. ψ der e^- sagt nur wie wahrscheinlich es ist, irgendwo ein e^- anzutreffen, wenn man es experimentell misst
3. durch Messung *kollabiert* ψ zu einem Peak am gemessenen Wert
4. es gilt die Heisenberg'sche Unschärferelation $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ (siehe 4)

2.2 Bedingungen aus der Statistik:

1. allgemein: $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int \psi_m^* \psi_n \, dr = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(r) \, dr = \delta_{mn}$ mit Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(r,t) = |\psi(r,t)|^2$
2. da $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(r) \, dr = 1$ muss ψ normiert sein, damit das Teilchen nicht zu einer Wahrscheinlichkeit ungleich 100 % im ganzen Raum vorfindbar ist
3. Erwartungswert/Mittelwert $\bar{A} \equiv \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{A} \rho(r) \, dr$
4. Varianz $\sigma^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

2.3 Schrödinger-Gleichung:

1. die Schrödinger-Gleichung hängt nur von zwei Funktionen ab: ψ und Potential V
2. (allg.) zeitabhängige: $i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V \cdot \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t)$
   a) Separationsansatz: $\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot f(t)$
3. zeitunabhängige: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \psi(x)$
   a) auch geschrieben als $\hat{H} \psi = E \psi$

2.4 Modellsysteme für die Form des Potentials V:

1. freies Teilchen (d.h. $V = 0$):
   a) zeitabhängiges Teilchen ist eine ebene Welle (ψ kann zum Zeitpunkt $t = 0$ 'lokalisiert' und dort **normiert** werden)
   $\rightarrow \psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ mit $\omega = \frac{E}{\hbar}$
   b) die Geschwindigkeit ist durch die Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{d}{dk}\omega$ und nicht durch die Phasengeschwindigkeit von ψ gegeben
   c) **Model vom unendlichen Potentialtopf anwendbar**

2. unendlicher Potentialtopf ($V(x) = 0$ für $0 \leq x \leq L$, sonst $V(x) = \infty$)
   a) $\psi(x) = A\sin(\frac{n\pi x}{L})$
   b) $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ mit L: Länge des Topfes
   c) **Anwendung** in der Berechnung von Absorptionsenergien (ΔE: HOMO $\rightarrow$ LUMO) bei Molekülorbitalen

3. harmonischer Oszillator ($V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$):
   a) $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ mit $n = 0, 1, 2, ...$
   b) 2 Lösungsansätze (mit Quantenzahl n):
      i. $\psi_n(x) =$ Normierung * (Polynom in x) * (Gauß-Funktion)
      $\rightarrow \psi_n(x) = A_n \cdot H_n(x) \cdot e^{-0.5x^2}$
      die Lösungen davon sind die Hermite-Polynom $H_n(x)$, die man nachschlagen kann
      ii. Leiteroperatoren $\hat{a}_\pm$ verringern/erhöhen die Energien einer bekannten Lösung in diskrete Schritte:
      $\hat{H}\psi = \hbar\omega(\hat{a}_\pm\hat{a}_\mp \pm 0.5)\psi = E\psi$, mit $\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x})$
      Hinweise:
         A. $\hat{a}_\pm$ wird direkt auf ψ angewendet
         B. $\hat{a}_-\psi_0 = 0$, da man vom untersten Energieniveau nicht 'absteigen' kann

      $\rightarrow \psi_n(x) = A_n \cdot (\hat{a}_+)^n \cdot \psi_0(x)$

4. Potentialstufe ($V(x) = V_0$ für $0 \leq x$, sonst $V(x) = 0$)
   a) Fallunterscheidung, ob $E > V_0$ oder $E < V_0$

5. Potentialbarriere ($V(x) = V_0$ für $-a \leq x \leq +a$, sonst $V(x) = 0$; mit Breite $2a$)

3 Arbeiten mit ψ

3.1 Grundregeln für Verwendung von ψ:

1. die Energieniveaus spalten sich im homogenen $\vec{B}$ auf: Zeeman-Effekt genannt

2. klassisch erlaubt: $V < E \rightarrow$ öszillierendes Verhalten von ψ"

3. klassisch verboten: $V > E \rightarrow$ Tunneleffekt kann auftreten (u.a. bei einer **Potentialbarriere** (5))

4. ψ besitzt Quantenzahlen: n bestimmt l, l bestimmt m
   a) Quantenzahl n (legt die diskreten Energiestufen fest): $n = 1, 2, 3, ...$
   b) Bahnquantenzahl l (gehört zu L^2): $0 \leq l \leq n - 1$ (**Anmerkung**: können nur ganzzahlig oder halbzahlig sein)
   c) magnetische Quantenzahl m (gehört zu L_z): $m = -l, ..., +l$ (**Anmerkung**: in ganzzahligen Schritten)

3.2 Photonen:

1. Wellenpackete = Überlagerung von ebenen Wellen

3.3 Messung von ψ mittels hermitische Operatoren:

1. Ort: $\hat{x}$

2. Impuls: $\hat{p}$

3. Gesamtenergie: $\hat{H}$

4. Drehimpuls: $\hat{L}_i = \sum_{jik} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$ (3.4)
   a) "Betragsinformation": $\hat{L}^2$
   b) (teilweise) "Richtungsinformation": $\hat{L}_z$

3.4 die 2 Drehimpulse L (Einheit: [$\hbar$]):

1. nice to know:
   a) die Eigenwerte von $\hat{L}^2$ sind $\lambda = \hbar^2 l(l + 1)$
   b) die Eigenwerte von $\hat{L}_z$ sind $\lambda = \hbar m$, mit Quantenzahl m
   c) $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$

   d) $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

      i. $\hat{L}_{\pm}$ verändert den Eigenwert von $\hat{L}_z$ um $\pm\hbar$, was die Einheit des Drehimpuls entspricht!

      ii. $\hat{L}_{\pm}$ verändert <u>nicht</u> den Eigenwert von $\hat{L}^2$

2. Bahndrehimpuls:

   a) nimmt nur ganzzahlige Werte für l ein: $l = 0, 1, 2, 3, ...$

      i. $l = 0 \rightarrow$ s-Orbitale

      ii. $l = 1 \rightarrow$ p-Orbitale

      iii. $l = 2 \rightarrow$ d-Orbitale

3. Spin s: eine Art ewige Eigendrehung der Teilchen

   a) aus dem Spin-Statistik-Theorem:

      i. Fermionen (z.B. e^-, Proton, Neutron): s=0.5 $\rightarrow \psi$ ist antisymmetrisch

         A. Fermionen sind „Einzelgänger“ d.h. sie können nicht am selben Ort sein

      ii. Bosonen (z.B. Photonen): s=1 $\rightarrow \psi$ ist symmetrisch

         A. Bosonen sind „Herdentiere“ (lieben Gleichschritt) d.h. z.B. können sich unzählige Photonen zusammentun und gemeinsam eine schwingende elektromagnetische Welle ausbilden

   b) $s = 0.5$:

      i. $s = 0.5 \rightarrow m_s = -0.5$ und $m_s = +0.5$

3.5 Störung des System (Störungstheorie):

1. Grundannahmen:

   a) die Lösung des ungestörten System ist bekannt

   b) die Störung ist klein