

# **Einführung in die Quantentheorie**

## **Theoretische Physik II**

Klemens Hammerer, Univ. Hannover

Sommersemester 2019

## Organisatorisches:

- **Dozent:** Klemens Hammerer  
Appelstrasse 2, Raum 114  
0511 762 17072  
klemens.hammerer@itp.uni-hannover.de  
<http://www.hammerer.itp.uni-hannover.de>
- **Übungsleitung:** Dr. Johannes Kleiner  
Appelstrasse 2, Raum 209B  
0511 762 17342  
Johannes.Kleiner@itp.uni-hannover.de
- **Sekretariat:** Birgit Gemmeke  
Appelstrasse 2, Raum 115  
+49 511 762 17072  
Birgit.Gemmeke@itp.uni-hannover.de

## Organisatorisches:

- **Vorlesung:**

Dienstag 08:15 - 09:45 & Donnerstag 10:15 - 11:45 Kleiner Physiksaal

- **Plenarübung:** Johannes Kleiner

Donnerstag 08:15 - 09:00, Kleiner Physiksaal

- **Übung:** Geb. 3701, Appelstrasse 2, 2. Stock

1. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 268 Großer Seminarraum

2. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 201

3. Gruppe: Dienstag 12:15 - 13:45 @ Geb. 3701 - 268 Großer Seminarraum

4. Gruppe: Dienstag 10:15 - 11:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

5. Gruppe: Mittwoch 08:15 - 09:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

6. Gruppe: Mittwoch 12:00 - 13:30 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

7. Gruppe: Dienstag 12:15 - 13:45 @ Geb. 3701 - 269 Kleiner Seminarraum

**Bitte in die Übungsgruppen eintragen!**

- **Ablauf des Übungsbetriebes:**

- Montag Abend: Übungsblatt und Präsenzübung auf Stud.IP abrufbar
- Dienstag: Lösungen des Übungsblattes der Vorwoche zu Beginn der Vorlesung abgeben, korrigierte Lösungen der Vorwoche am Ende der Vorlesung mitnehmen.
- Dienstag/Mittwoch: Bearbeiten der Präsenzübung in den Übungsgruppen.
- Donnerstag: Lösung der Übungsaufgaben der Vorwoche in der Plenarübung.

## Literatur:

- Quantum Mechanics (**Vol.1 & 2**), **C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe** (Wiley, deutsche Ausgabe bei de Gruyter)
- **Grundkurs Theoretische Physik** (Bd. 5/1 & 5/2), W. Nolting (Springer)
- **Quantenmechanik**, F. Schwabl (Springer)
- **Quantenmechanik Einführung**, W. Greiner (Harri Deutsch)
- **Quantum Mechanics** (Vol.1 & 2), A. Galindo, P. Pascual (Springer)
- Andere: Sakurai, Hecht, Baym, Schiff, Messiah, Griffiths, Merzbacher, Landau-Lifshitz,...
- "Pflichtlektüre": Feynman Lectures on Physics

## Skript:

Die Folien werden in der Regel jeweils am Abend vor der Vorlesung auf Stud.IP zugänglich gemacht. Der Inhalt der Vorlesung wird sich weitgehend mit dem der Folien decken. Alle Rechnungen werden im Detail an der Tafel ausgeführt.

## Vorbemerkungen

Ziel der Vorlesung ist die Einführung in die (nicht-relativistische) **Quantenmechanik**. Sie

- bildet den theoretischen Rahmen zur Beschreibung der atomaren und subatomaren Physik (Atom-, Molekül-, Festkörper-, Kern- und Elementarteilchenphysik)
- ist die Grundlage für das Verständnis des Aufbaus der Materie
- war der Auslöser wichtiger technischer Entwicklungen, wie zum Beispiel der Halbleitertechnologie, Laser, Kerntechnik, etc.
- erfordert ein neues physikalisches “Weltbild”
- vereinheitlicht das Teilchenbild der klassischen Mechanik und des Wellenbildes der Elektrodynamik

# 1 Wellenmechanik

## 1.1 Klassische Physik

### (Hamiltonsche) Mechanik

- Der **Zustand** eines Partikels wird durch die Angabe von **Ort**  $\vec{x}$  und **Impuls**  $\vec{p}$ , d.h. durch einen Punkt  $(\vec{x}, \vec{p})$  im Phasenraum beschrieben
- Seine Dynamik ist durch die **Hamiltonfunktion**  $H(\vec{x}, \vec{p})$  und die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

festgelegt.

Z.B. für ein Teilchen der Masse  $m$  in einem zeitunabhängigen Potential  $V(\vec{x})$  ist die Hamiltonfunktion die Gesamtenergie

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

und die Bewegungsgleichungen

$$\dot{x}_i = \frac{p_i}{m} = v_i \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i$$

- Lösen der Bewegungsgleichungen unter Anfangsbedingungen  $(\vec{x}_0, \vec{p}_0)$  zum Zeitpunkt  $t_0$  ergibt die **Trajektorie**  $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$  des Teilchens. Die Trajektorie legt die Zustände des Teilchens zu beliebigen anderen Zeitpunkten fest.

- Die Messung einer physikalischen **Messgröße**  $M(\vec{x}, \vec{p})$  zum Zeitpunkt  $t$  liefert das Ergebnis  $M(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ . Z.B. Energie  $H(\vec{x}, \vec{p})$ , Drehimpuls  $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

Alle diese Punkte müssen in der Quantenmechanik revidiert werden.

## Klassische Elektrodynamik

- Elektromagnetische Felder werden durch Angabe des elektrischen Feldes  $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$  und magnetischen Feldes  $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x})$  beschrieben
- Deren Dynamik ist durch die Maxwellgleichungen festgelegt. In Abwesenheit von Ladung und Strömen, erfüllen die Felder die Wellengleichung

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathcal{E}(\vec{x}, t) = 0$$

mit der fundamentalen Lösung

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)},$$

wobei  $\mathcal{E}$  eine beliebige Komponente von  $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$  darstellt und  $A$  die **Amplitude** der Welle bezeichnet. Die physikalische Lösung ist  $\text{Re}(\mathcal{E}(\vec{x}, t)) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\vec{x}, t) + \mathcal{E}(\vec{x}, t)^*)$ .

- Die **Dispersionsrelation**, d.h. der Zusammenhang zwischen **Kreisfrequenz**  $\omega = 2\pi\nu$  und **Wellenvektor**  $\vec{k}$  bzw. **Wellenzahl**  $k = |\vec{k}|$ , lautet für elektromagnetische Wellen (im Vakuum)

$$\vec{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad \text{bzw.} \quad k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}.$$



- Die Wellengleichung ist linear, also gilt das **Superpositionsprinzip**: Jede Linearkombination von Lösungen ist wieder eine Lösung. Die allgemeine Lösung ist eine Superposition

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = \int d^3k A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

wobei  $A(\vec{k})$  die Amplitude für Komponente mit Wellenvektor  $\vec{k}$  ist.

- Die Energie im elektromagnetischen Feld ist

$$\begin{aligned} E &= \int d^3x \frac{\varepsilon_0}{2} (\mathcal{E}^2(\vec{x}, t) + c^2 \mathcal{B}^2(\vec{x}, t)) \\ &= \int d^3x \varepsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

(wegen  $|\mathcal{E}| = c|\mathcal{B}|$ ) und der Energiefluss (Poynting-Vektor)

$$\vec{S} = \mu_0 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$$

bzw. für skalare Felder

$$|\vec{S}| = c\varepsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t)$$

Gemessen wird (in der Regel) die Intensität. Das ist der zeitlich über eine Periode  $T = 2\pi/\omega = 1/\nu$  gemittelte Energiefluss

$$\begin{aligned} I(\vec{x}, t) &= c\varepsilon_0 \frac{1}{T} \int_t^{t+T} dt' \mathcal{E}^2(\vec{x}, t') \\ &= c\varepsilon_0 |\mathcal{E}(\vec{x}, t)|^2 \end{aligned}$$

- Der Nachweis der Wellennatur des elektromagnetischen Feldes im Youngschen Doppelspaltexperiment (Abb. aus Schwabl, Quantenmechanik)

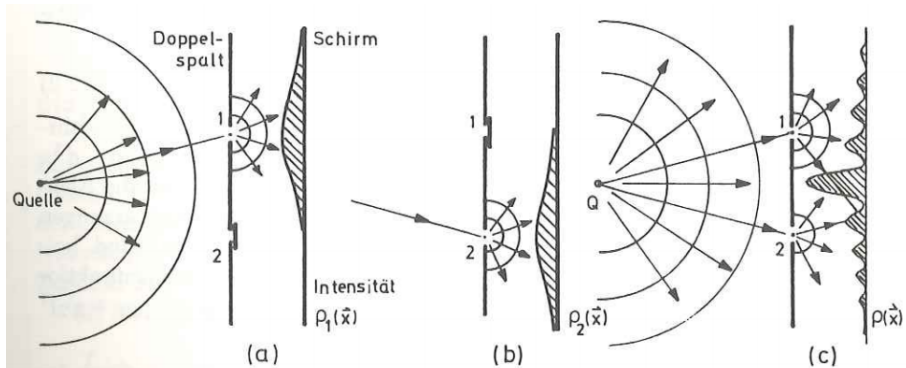


Abb. 2.1. Beugung am Doppelspalt (a) mit Spalt 1 geöffnet, (b) mit Spalt 2 geöffnet, (c) beide Spalte geöffnet

$$\begin{aligned}
 I &\sim |E|^2 \\
 &\sim |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\text{Re}(E_1 E_2^*)
 \end{aligned}$$

## Zusammenfassung

Mechanik	Elektrodynamik
Teilchen	Wellen
Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$	Felder $\mathcal{E}(\vec{x}, t), \mathcal{B}(\vec{x}, t)$
Hamiltonsche (Newtonschen) Bewegungsgleichungen	Maxwellgleichungen
Die Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ der Teilchen gehen als Ladungs- und Stromdichten in die inhomogenen Maxwellgleichungen ein; Die Lösungen $\mathcal{E}(\vec{x}, t), \mathcal{B}(\vec{x}, t)$ der Maxwellgleichungen gehen über die Lorentzkraft in die Bewegungsgleichungen der Teilchen ein.	

## 1.2 Empirische Grundlagen der Quantenmechanik

### Wellen haben Teilchencharakter

- Erste Quantenhypothese durch M. Planck (1900) zur Erklärung des Spektrums der **Schwarzkörperstrahlung**: die Energie einer Welle der (Kreis-)Frequenz  $\omega = 2\pi\nu$  ist ein ganzzahliges Vielfaches eines elementaren Energiequantums

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Das **Plancksche Wirkungsquantum**  $h$  hat die Einheit einer Wirkung = Energie  $\times$  Zeit,  $[h] = \text{Js}$ . Aus Plancks Quantenhypothese ergibt sich das **Plancksche Strahlungsgesetz**. Es beschreibt das empirisch bekannte Spektrum thermischer Strahlung, wenn

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ Js} \qquad \rightsquigarrow \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

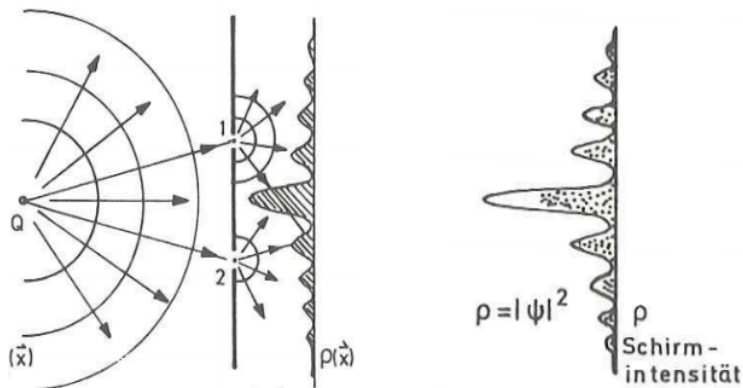
gewählt wird.

- Albert Einsteins Erklärung für den **photoelektrischen Effekt** (1905): Licht der Frequenz  $\omega$  besteht aus Teilchen der Energie  $E = \hbar\omega$  und die Lichtteilchen (Photonen) haben einen Impuls

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (\vec{k} \text{ Wellenvektor})$$

- **Comptoneffekt** (1924, Vergrößerung der Wellenlänge des Licht bei Streuung an Elektronen) kann mit  $E = \hbar\omega$ ,  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  als elastischer Stoß zweier Teilchen erklärt werden.

- Doppelspaltexperiment mit Einzelphotonauflösung (Abb. aus Schwabl, Quantenmechanik)



Interferenz zeigt sich in der Statistik der Detektionsereignisse

## Teilchen haben Wellencharakter

- **Bohrsches Atommodell** (1913)

1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen. Sie strahlen dabei keine elektromagnetische Energie ab.
2. Erlaubt sind nur Kreisbahnen mit Drehimpuls

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3$$

3. Elektromagnetische Energie wird nur bei einem Übergang zwischen zwei Kreisbahnen abgestrahlt.

### Konsequenzen aus den Bohrschen Postulaten:

- Mit dem Virialsatz

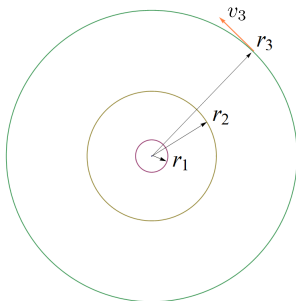
$$E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}E_{\text{pot}} \qquad \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

folgt aus der Forderung  $L = mrv = n\hbar$  die Geschwindigkeit und der Radius für die  $n$ -te Kreisbahn

$$v_n = \alpha c \frac{1}{n} \qquad r_n = a_0 n^2$$

mit der Feinstrukturkonstant  $\alpha$  und dem Bohrradius  $a_0$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \qquad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m c} \simeq 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



- Die Energie der  $n$ -ten Kreisbahn ist

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m\alpha^2 c^2}{n^2}$$

Bei einem Übergang von der  $n$ -ten zur  $m$ -ten Kreisbahn wird Strahlung emittiert mit einer Frequenz

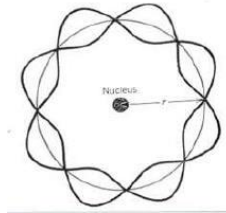
$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

wobei  $R = \frac{m\alpha^2 c^2}{2h}$  die Rydbergkonstante ist.

- Luis de Broglie (1924): Die Bewegung eines massiven Teilchens mit Impuls  $p$  entspricht einer “Materiewelle” mit einer **de-Broglie-Wellenlänge**

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Damit entsprechen die Bohrschen Kreisbahnen stehenden Wellen der Materiewelle



$$\lambda_n = \frac{h}{mv_n} = 2\pi a_0 n \quad \longrightarrow \quad n\lambda_n = 2\pi a_0 n^2 = 2\pi r_n$$

- Direkter Nachweis der Wellennatur geschieht in Interferenzexperimenten:  
 Davission und Germer (1927): Elektronen an Kristallgittern  
 Jönssen (1954): Doppelspaltexperiment mit Elektronen  
 Interferometrie mit organischen Molekülen <http://www.quantumnano.at/quantum-invaders.7006.html>



## 1.3 Die Wellenfunktion

[Es folgt eine provisorische und vereinfachte Darstellung der Postulate der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Die exakte und vollständige Darstellung folgt später in Kapitel 2.]

- Die Erfahrung zeigt:
  - Der **Zustand** eines Teilchens wird durch eine (komplexe) **Wellenfunktion**

$$\psi(\vec{x}, t)$$

beschrieben.

- Seine **Dynamik** (zeitliche Entwicklung, Evolution) ist durch die **Schrödingergleichung** festgelegt

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)$$

Die Lösung der Schrödinger Gleichung unter einer Anfangsbedingung  $\psi(\vec{x}, 0)$  ergibt die zeitlich entwickelte Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}, t)$ .

- Die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}, t)$  legt die **Statistik** der Resultate von Messungen physikalischer Messgrößen  $A(\vec{x}, \vec{p})$  zum Zeitpunkt  $t$  fest:

Für die Messung der **Position** des Teilchens gilt (Bornsche Regel): Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  in einem Volumen  $d^3x$  am Ort  $\vec{x}$  vorzufinden, ist

$$P(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

D.h. die **Wahrscheinlichkeitsdichte** im Raum ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad ([\rho(\vec{x}, t)] = m^{-3})$$

- Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum vorzufinden, muss 1 sein:

$$1 = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

Wir fordern daher, dass eine als Wellenfunktion in Frage kommende Funktion  $\psi(\vec{x}, t)$

- quadratintegrabel und
- auf 1 normiert ist.

Eine Wellenfunktion (für den Bewegungszustand eines Teilchens) ist damit Element des **Hilbertraumes**  $L^2(\mathbb{R}^3)$  der quadratintegrablen Funktionen,

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}, \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}.$$

- Die **Schrödinger Gleichung für ein freies Teilchen** ( $V(\vec{x}, t) \equiv 0$ )

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t).$$

wird durch **ebene Wellen** gelöst

$$\psi(\vec{x}, t) = c e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

mit  $c \in \mathbb{C}$  und der Dispersionsrelation

$$\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}.$$

Mit  $E = \hbar\omega$  und  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  (bzw.  $p = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$ ) ist das äquivalent zu  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Eine ebene Materiewelle mit Wellenvektor  $\vec{k}$  beschreibt die Bewegung eines freien Teilchens mit Energie

$$E = \frac{(\hbar \vec{k})^2}{2m}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer ebenen Welle ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = |c|^2 \equiv \text{const.}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist also gleichmäßig im ganzen Raum. Ebene Wellen sind nicht normierbar (nicht Element von  $L^2(\mathbb{R}^3)$ )! Sie sind keine physikalischen Zustände.

Durch Superposition von ebenen Wellen können normierbare, physikalische Zustände aufgebaut werden, sog. **Wellenpakete**:

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t]}$$

löst die Schrödinger Gleichung, wenn  $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$  für beliebige Amplituden  $c(\vec{k})$ .

Normierung erfordert

$$1 = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3k |c(\vec{k})|^2$$

Das heißt, es muss  $c(\vec{k})$  selbst quadratintegabel und normiert sein.

- Die Lösung der Schrödingergleichung für eine vorgegebene Anfangsbedingung  $\psi(\vec{x}, 0)$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  erhält man aus der Bedingung

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}}.$$

Also ist  $\psi(\vec{x}, 0)$  die Fouriertransformierte von  $c(\vec{k})$ . Die inverse Transformation ergibt

$$c(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, 0) e^{-i\vec{k}\vec{x}}.$$

Einsetzen der aus der Anfangsbedingung  $\psi(\vec{x}, 0)$  bestimmten Amplituden  $c(\vec{k})$  in die allgemeine Lösung ergibt die Wellenfunktion zu Zeiten  $t$

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k}\vec{x} - \omega t]}$$

## 1.4 Die Impulswellenfunktion

- Die Koeffizienten  $c(\vec{k})$  sind die Amplituden der ebenen Wellen  $e^{i\vec{k}\vec{x}}$  (mit festem Impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ) im Wellenpaket  $\psi(\vec{x})$ .  
Wir erwarten, dass  $|c(\vec{k})|^2$  die Wahrscheinlichkeit festlegt, bei einer Messung des Impulses  $\vec{p}$  an einem Teilchen im Zustand  $\psi(\vec{x})$  den Wert  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  zu finden.
- Allgemein definieren wir die **Impulswellenfunktion**  $\varphi(\vec{p}, t)$  bei gegebener **(Raum)Wellenfunktion**  $\psi(\vec{x}, t)$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$$

(Damit gilt  $\varphi(\vec{p}, 0) = \hbar^{-3/2} c(\vec{p}/\hbar)$ .)

Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Impulses einen Wert  $\vec{p}$  zu finden ist

$$P(\vec{p}, t) = |\varphi(\vec{p})|^2 d^3p.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum ist

$$|\varphi(\vec{p})|^2.$$

Es gilt

$$\int d^3p |\varphi(\vec{p})|^2 = 1.$$

## 1.5 Wellenmechanik in einer Dimension

- Wir betrachten im Folgenden die Bewegung eines Teilchens in **einer Dimension**. Sein Zustand wird beschrieben durch eine Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  in

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \int dx |\psi(x)|^2 < \infty \right\}.$$

- Eine Teilchen mit Energie  $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$  wird beschrieben durch eine **ebene Welle**

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

- Ein **Wellenpaket** in einer Dimension ist

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk c(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

mit  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$  und  $\int_{-\infty}^{+\infty} dk |c(k)|^2 = 1$ . Die zugehörige Impulswellenfunktion ist

$$\varphi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar}$$

Insbesondere für  $t = 0$  ist  $\varphi(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} c(p/\hbar)$ .

- Beispiel: **Gaussches Wellenpaket**

$$\psi(x, 0) = \left( \frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x - x^2/a}$$

mit  $k_0, a \in \mathbb{R}$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ort ist

$$\rho(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = \left( \frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} e^{-2x^2/a^2}$$

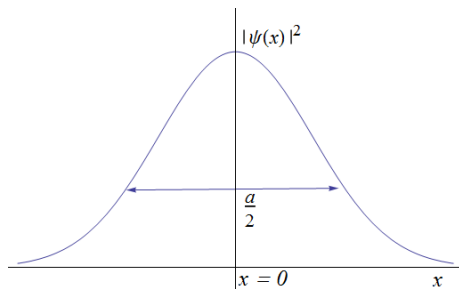
Es gilt:

$$\int dx \rho(x) = 1$$

$$\langle x \rangle = \int dx x \rho(x) = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int dx x^2 \rho(x) = \frac{a^2}{4}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2}$$



- Die Amplituden  $c(k)$  sind

$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx} \\ &= \left( \frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} e^{-(k-k_0)^2 a^2 / 4} \end{aligned}$$

- Die Impulswellenfunktion zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist

$$\varphi(p, 0) = \left( \frac{a^2}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/4} e^{-(p-p_0)^2 a^2 / 4\hbar^2}$$



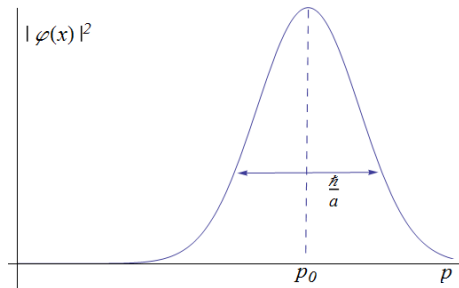
Es gilt:

$$\int dp |\varphi(p, 0)|^2 = 1$$

$$\langle p \rangle = \int dp p |\varphi(p, 0)|^2 = p_0 = \hbar k_0$$

$$\langle p^2 \rangle = \int dp p^2 |\varphi(p, 0)|^2 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{a}$$



Das heißt, dass die Unschärfen in Ort und Impuls nicht unabhängig sind

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

- Das zeitlich entwickelte Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} = \left( \frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} \frac{e^{i(k_0 x - \varphi)}}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/4}} e^{-\frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\gamma t)}}$$

wobei

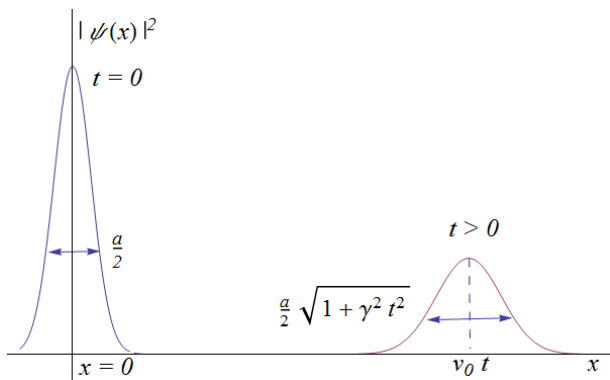
$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} \quad \gamma = \frac{2\hbar}{ma^2} \quad \varphi = \theta + \frac{k_0 v_0 t}{2} \quad \tan 2\theta = \gamma t$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 \\ &= \left( \frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \frac{1}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/2}} e^{-\frac{2(x - v_0 t)^2}{a^2(1 + \gamma^2 t^2)}} \end{aligned}$$

mit dem Mittelwert

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= v_0 t \\ \Delta x_t &= \frac{a}{2} \sqrt{1 + \gamma^2 t^2} \end{aligned}$$



- Es gibt keine Änderung des Impulses bzw. der Statistik von Impulsmessungen für ein freies Teilchen und

$$|\varphi(p, t)|^2 = |\varphi(p, 0)|^2$$

## 1.6 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

- In der Elektrodynamik gilt für die Ladungsdichte  $\rho_q(\vec{x}, t)$  und die Stromdichte  $\vec{j}_q(\vec{x}, t)$  der Erhaltungssatz ( $\rightarrow$  Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0$$

Die Gesamtladung ist erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3x \rho_q(\vec{x}, t) &= - \int_V d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= - \int_{\partial V} d\vec{S} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= 0, \quad \text{für } V \rightarrow \infty \text{ wegen } \lim_{x \rightarrow \infty} \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0 \end{aligned}$$

- In der Quantenmechanik gilt ein entsprechender **Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit**. Wir betrachten die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ &= \dot{\psi}^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \dot{\psi}(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi$$

impliziert

$$-i\hbar\dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*$$

Damit ergibt sich

$$\psi^*\dot{\psi} + \psi\dot{\psi}^* = \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\Delta\psi + V\psi^*\psi \right) - \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\Delta\psi^* + V\psi\psi^* \right)$$

Also

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*) = 0$$

Wir definieren den **Wahrscheinlichkeitsstrom**

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x}, t) \right) \\ &= \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[ \psi^*(\vec{x}, t)(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x}, t) \right]\end{aligned}$$

so, dass

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \vec{\nabla}\psi^* \cdot \vec{\nabla}\psi + \psi^*\Delta\psi - \vec{\nabla}\psi \cdot \vec{\nabla}\psi^* - \psi\Delta\psi^* \right)$$

Damit gilt der **Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit  $\int d^3x \rho(\vec{x}, t) = 1$  ist erhalten (Beweis wie in der Elektrodynamik;  $\lim_{\vec{x} \rightarrow \infty} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$  weil  $\lim_{\vec{x} \rightarrow \infty} \psi(\vec{x}, t) = 0$ )

- Beispiel: Der Wahrscheinlichkeitsstrom für eine ebene Welle  $\psi(\vec{x}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$  ist

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(i\vec{k})\psi - \psi(-i\vec{k})\psi^* \right) \\ &= \frac{2i\vec{k}\hbar}{2mi} \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \end{aligned}$$

- Beispiel: Superposition zweier ebener Wellen in 1D

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{i(-kx - \omega t)}$$

der Strom ist

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \vec{e}_x$$