Teil I

Einführung in die Quantenmechanik

1 Teilchen und Wellen

1.1 Klassische Physik

1.1.1 Mechanik (Teilchentheorie)

(Abb 1)

<u>Newton:</u>

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{p}(t)}{dt} &= \vec{F}(t) \\ \vec{p}(t) &= m\frac{d\vec{r}(t)}{dt} \end{aligned}$$

1.1.2 Elektrodynamik („Feldtheorie“)

$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)$, $\vec{B}(\vec{r},t)$, $\varrho(\vec{r},t)$, $\vec{j}(\vec{r},t)$

Verknüpfung durch die Maxwell-Gl.

$\varrho(\vec{r},t) = \sum\limits_{i=1}^{N} q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$ Ladungsdichte

$\vec{j}(\vec{r},t) = \sum\limits_{i=1}^{N} q_i \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$ Stromdichte

Kraft auf Teilchen

$\vec{F}_i = q_i \left(\vec{\mathcal{E}}_i + \vec{v}_i \times \vec{B}_i\right)$

Wellenerscheinungen $\Rightarrow \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) = 0$ Wellengleichung im Vakuum

$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial 2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \triangle$

Analog für Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r},t)$

„Einfache“ Lösung: „ebene Welle“

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) &= \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega\left(\vec{k}\right)\cdot t\right)} \\ \omega\left(\vec{k}\right) &= c\left|\vec{k}\right| = c \cdot k \end{aligned}$$

Superposition (lineare Dgl) $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) = \int \underbrace{\tilde{\vec{\mathcal{E}}}\left(\vec{k}\right)}_{\text{folgt aus Randbedingungen}} \cdot e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \underbrace{c \cdot k}_{\omega} \cdot t\right)} d^3k$

Wellenpaket

1.1.3 Wellencharakter

- Beugung
- Brechung
- Interferenz

1.1.4 Bemerkungen

- $\vec{\mathcal{E}}$-Feld als ebene Welle $\rightarrow \vec{B}(\vec{r},t) = \frac{1}{\omega}\left(\vec{k}\times\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right)$
- Allgemein:
  Energie des Feldes im Volumen V
  $E = \frac{\varepsilon_0}{2}\int\limits_V \left|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r + \frac{1}{\mu_0}\frac{1}{2}\int\limits_V \left|\vec{B}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$
  Ebene Welle: $E = \varepsilon_0\int\limits_V \left|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$
  „Energie ist proportional zu $\left|\vec{\mathcal{E}}\right|^2$"
  Impuls eines eltromag. Feldes
  $\vec{P}_{Feld} = \varepsilon_0\int\limits_V \left(\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\times\vec{B}(\vec{r},t)\right) d^3r$
  Ebene Welle: $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega}\varepsilon_0\int\limits_V \mathcal{E}^2(\vec{r},t)\, d^3r$

  $$\boxed{\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega}E}$$

1.2 Vorstufe der Quantenmechanik („Ältere Quantentheorie")

(1900 - 1925)

1.2.1 Teilchencharakter des Lichts (el-mag Strahlung)

Hohlraumstrahlung (Abb 2)

„Schwarzer Körper" Strahlung wird Vollständig absorbiert

Energieverteilung $u(\nu,T) = \frac{8\pi}{c^2}\cdot h\cdot\frac{\nu^3}{e^{-\frac{h\nu}{k_BT}}-1}$

ν: Wellenfrequenz

T: Temperatur

k_B: Boltzmann-Konstante

$h = 6,626\cdot 10^{-34}\text{Js}$

Erklärung durch Planck mit folgender Annahme:

Elektromagnetische Strahlung wird (von den Atomen in den Wänden) in Form von „Quanten" der Energie $E = h\nu\cdot n$ $(n = 1,2,3,...)$ abgegeben

„Quantenhypothese von Max Planck"

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

Photoeffekt (1905) (Abb 3)

<u>Energie pro Elektron</u>

$E = \underbrace{a}_{\text{universell}}\cdot\omega - \underbrace{W}_{\text{materialspezifisch}}$ (exp Resultat) $a = \hbar$

- Zahl der emitieren Elekronen proportional zur Intensität
- Kinetische Energie hängt von Frequenz ab
- Unterhalb einer Schwellfrequenz treten keine Elektronen aus

Einstein Licht $\hat{=}$ „Ansammlung“ von Energiequanten mit $E = \hbar\omega$ (Lewis 1986: „Photon“)

Festkörper: (Abb 4)

- Energie des Photon wird komplett an Elektron abgegeben
- Intensität des Lichts bestimmt die <u>Anzahl</u> der emitierten Elektronen

Impuls Feld: $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega} \underbrace{E}_{\text{Energie des Feldes}}$

P von Photon:

$$\boxed{\vec{P}_{Photon} = \frac{\vec{k}}{\omega}\hbar\omega = \hbar\vec{k}}$$

Impuls eines Lichtquants

1.2.2 Vorstellung des Aufbaus von Atomen

Materie: „Summe“ von Atomen

Atom: Kern + Elektronen

Experimentelle Beobachtung beim Wasserstoffatom Emission $\hat{=}$ Linienspektrum

Energie: $\Delta E_{n,m} = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \cdot 13,6059\text{eV}$

Rutherford-Modell (Abb 5)

|Zentrifugalkraft| = |Coulombkraft|

$$\frac{mv^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \tag{1}$$

Energie: $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$

<u>Probleme:</u>

- Ausdehnung der Atome (d.h. r) ist nicht bestimmbar
- Beschleunigte Elektronen (Kreisbahn) strahlen nach klassischer Elektrodynamik Energie ab
- Alle Energien sind möglich (Widerspruch zu Linienspektren)

Bohr'sches Atommodell Zusatzannahmen:

- Drehimpuls ist quantisiert: $\left|\vec{L}\right| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar \; n = 1, 2, ...$
- Bei festem n erfolgt Umlauf „strahlungslos“
- Beim Wechsel der Kreisbahn von $\left|\vec{L}\right| = n\hbar$ nach $\left|\vec{L}\right| = n'\hbar$ wird Energie $\Delta E = E_n - E_{n'}$ abgegeben

$\left|\vec{L}\right| = mvr \overset{!}{=} n\hbar \Rightarrow v$ dann (1) mit $m \cdot r^3$ multipliziert

$$\Rightarrow E_n = -\underbrace{\frac{e^4}{\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2 2\hbar^2}}_{13{,}6059\text{eV}}\frac{1}{n^2}$$

$\Rightarrow \Delta E_{n,m} = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \cdot 13,6059\text{eV}$

1.3 Materiewellen

Problem: Klassische Physik beschreibt „Mikrowelt“ nicht genau

Stand der Physik 1923

	Licht	Materie
„klassische“ Experimente	Bei Ausbreitung Wellencharakter → Maxwell-Gl	Makroskopische Körper: Teilchencharakter → Newton-Gl
„nicht klassische“ Experimente	Bei Emission und Absorbtion: Teilchencharakter $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$	Verhalten auf atomarer Ebene Materiewelle? de Broglie (1923)

→ „Welle-Teilchen-Dualismus“

> Auch für massive, freie Teilchen sollen die von Einstein für Lichtquanten postulierten Zusammenhänge zwischen Energie und Frequenz, bzw. Impuls und Wellenvektor gelten:
>
> $$E = \hbar\omega, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Hypothese von de Broglie

Energie: $E = \frac{p^2}{2m} \underset{\text{de B.}}{=} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \underset{\text{de B.}}{=} \hbar\omega \Rightarrow$

$$\underbrace{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}}_{\text{Dispersionsrelation}} \tag{2}$$

Ausbreitungsgeschwindigkeit

$v_{Gruppe} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$

2 Wellenmechanik des freien Teilchens

2.1 Wellengleichung

Idee: Ordne Teilchen eine Wellenfunktion zu $\psi(\vec{r}, t)$

Freies Teilchen

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega(k)t\right)} \tag{3}$$

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

- Lässt sich eine Vorschrift zur Berechnung von $\psi(\vec{r}, t)$ angeben?
- Welche physikalische Bedeutung hat $\psi(\vec{r}, t)$?

2.1.1 Motivation einer Wellengleichung

Elektrodynamik: Wellengleichung $\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = 0$

Betrachte $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)}$

$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega\psi(\vec{r}, t)$, $\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) = i\vec{k}\psi(\vec{r}, t)$, $\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}, t) = -k^2\psi(\vec{r}, t)$

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

$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{\hbar k^2}{2m}\psi(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}, t)$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\psi(\vec{r}, t) \tag{4}$$

„Schrödinger-Gleichung für freies Teilchen“ $\hat{=}$ Differentialgleichung

- 1. Ordnung in der Zeit
- 2. Ordnung im Ort

$\Rightarrow$ Angabe von $\psi\left(\vec{r}, t=t_0\right)$ legt Lösung vollständig fest

- Die Wellengleichung ist linear in $\psi\left(\vec{r}, t\right)$
  $\Rightarrow$ Superpositionsprinzip
- ist homogen

Beachte: $\psi = \cos\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)$ oder $\psi = \sin\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)$ sind <u>keine</u> Lösungen der Wellengleichung

Bis auf den Spezialfall $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\psi\left(\vec{r}, t\right)$ sind die Wellenfunktionen $\psi\left(\vec{r}, t\right)$ <u>komplex</u>.

ψ komplex $\rightarrow$ ψ ist vermutlich nicht direkt mit physikalischer Größe verknüpft

$\left|\psi\left(\vec{r}, t\right)\right|^2$ reel $\rightarrow$ Beschreibt $\left|\psi\right|^2$ die Dichte des Teilchens? (Idee von Schrödinger)

Ebene Welle $\left|\psi\left(\vec{r}, t\right)\right|^2 = \left|\psi_0 e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}\right|^2 = \left|\psi_0\right|^2 \mathrel{\hat{=}}$ Teilchen wäre über den ganzen Raum gleichmäßig verschmiert

Idee: Wellenpaket beschreibt Teilchen

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^{\frac{3}{2}}} \int f\left(\vec{k}\right) e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega(k)t\right)} d^3k \tag{5}$$

2.2 Wellenpaket

2.2.1 Eindimensional

Idee: Teilchen sei bei $t = 0$ am Ort $x = 0$

(Abb 5)

$\left|\psi\right|^2 = \delta\left(x\right) \rightarrow \psi = \sqrt{\delta\left(x\right)} \underbrace{e^{i\varphi}}_{\text{Phasenfaktor}}$

$\sqrt{\delta\left(x\right)}$ ist schlecht zum Rechnen. Daher:

$$\lim_{\gamma\rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma} e^{-\frac{x^2}{j^2}} = \delta\left(x\right)$$

Also:

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{\gamma}} e^{-i\frac{x^2}{2\gamma^2}} \cdot e^{ik_0x}$$

Wie verändert sich $\psi\left(\vec{r}, t\right)$ im Laufe der Zeit?

$$\psi\left(x, t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f\left(k\right) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \tag{6}$$

Bei $t = 0$:

$$\psi\left(x, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f\left(k\right) e^{ikx} dk$$

$$\Rightarrow f\left(k\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi\left(x, 0\right) e^{-idx} dx$$

(Umkehrung der Fouriertransformation)

2.2.2 Hilfsintegral

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} e^{i\beta x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}$$

für $\alpha > 0$

$$\Rightarrow f(k) = \frac{\sqrt{j}}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2}\gamma^2}$$

Einsetzen in (6) liefert (analog zu Aufgabe T2)

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{4\alpha}} e^{ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0}{2m}t\right)}$$

mit $\alpha = \frac{\gamma^2}{2} + i\frac{\hbar}{2m}t$

$\psi \sim$ Normierungsfaktor Gausfunktion: Ebene Welle

(Abb 7)

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{\gamma}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{2|\alpha|} e^{-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{4}\left(\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{\alpha^\star}\right)}$$

$$\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha^\star} = \frac{\gamma^2}{|\alpha|^2}$$

2.2.3 Breite B des Wellenpakets

(Abb 8)

$\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right) = \frac{4|\alpha|^2}{\gamma^2} \Rightarrow x_1,\ x_2$

$$B = x_1 - x_2 = \frac{4|\alpha|}{\gamma} = \frac{4}{\gamma}\left(\frac{\gamma^4}{4} + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$B = 2\gamma\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2\gamma^4}}$$

mit $T^2 := \frac{m^2\gamma^4}{\hbar^2}$ „Zerfallszeit“

$$B = 2\gamma\sqrt{1 + \frac{t^2}{T^2}}$$

(Abb 9)

$\rightarrow$ Wellenpaket läuft auseinander

$\rightarrow$ Interpretation von $|\psi(x,t)|^2$ als Materiedichte würde beudeten, dass das Teilchen zerfließt.

Widerspruch zu experimenteller Erfahrung

Idee: Born

$\boxed{|\psi(\vec{r},t)|^2\text{: Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen am Ort } \vec{r} \text{ zur Zeit } t \text{ zu finden}}$

1. Elektron: $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$kg, Radius: $r = 2,8 \cdot 10^{-15}$m, $\gamma = r$
   $T = 6,8 \cdot 10^{-23}$s

2. Bleikugel: $m = 0,1$g, $r = 1,3 \cdot 10^{-3}$m, $\gamma = r$
   $T = 1,6 \cdot 10^{+24}$s $= 5,1 \cdot 10^{16}$Jahre

2.3 Bedeutung der Wellenfunktion

$|\psi(\vec{r},t)|^2 \neq$ Materiedichte

2.3.1 Doppelspaltexperiment

(Abb 10)

(Folie Internet)

„Auftreffpunkte“ einzelner Photonen sind zufällig.

Viele Photonen $\rightarrow$ regelmäßiges Beugungsbild

Auftreffen erfolgt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

Betragsquadrat $|\psi(\vec{r},t)|^2$ ist die Aufenthaltwahrscheinlichkeit der Teilchen

Max Born (1926)

Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumen V zu finden

$$W(V) = \int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3r$$

2.3.2 Normierung

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3r = 1}$$

$\Rightarrow \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\,d^3r = 1 \rightarrow \psi(\vec{r},t)$: quadratintegrable Funktion

$\Rightarrow$ Wellenfunktion fällt im „Unendlichen“ schnell ab

2.3.3 Periodische Funktion

Normierung auf Volumen V

$$\int_V \left|\psi(\vec{r},t)^2 \, d^3r = 1\right|$$

Ebene Welle: $\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}$, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$\Rightarrow |\psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi_0|^2 \cdot 1$

Normierung auf Volumen $V \Rightarrow \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \underbrace{\text{Phasenfaktor}}_{\text{wird typsicherweise zu „Eins” gewählt}}$

$$\boxed{|\psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{1}{V}}$$

2.3.4 Wellenpaket

Bei $t = 0$ ist das Teilchen bei $\vec{r} = 0$ lokalisiert

$t > 0$: Wellenpaket zerfließt $\Rightarrow |\psi(\vec{r},t)|^2$ wird „breiter“ $\Rightarrow$Kentniss über Aufenthaltsort wird immer ungenauer

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\psi(\vec{r},t) \Rightarrow$ Zeitliches Verhalten von $\psi(\vec{r},t)$ ist streng deterministisch.

Ort und Impuls sind nicht gleichzeitig genau bestimmbar

2.4 Quantenmechanische Erwartungswerte

2.4.1 Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Zufällige Größen $X_1, X_2, .. X_N$ können N Werte annehmen

Wahrscheinlichkeit, dass X_i auftritt: w_i

1. $0 \leq w_i \leq 1$
2. $w_i = 1$ (sicheres Ergebnis)
3. $\sum\limits_{i=1}^{N} w_i = 1$ (Normierung)

Mittelwert (mathematischer Erwartungswert)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \sum_{i=1}^{N} x_i w_i \\ \langle f(x) \rangle &= \sum_{i} f(x_i) w_i \end{aligned}$$

Streuung

$$\begin{aligned} S &= \left\langle \left(\langle x \rangle^2 - x \right)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \langle x \rangle^2 - 2x \langle x \rangle + x^2 \right\rangle \\ &= \langle x \rangle^2 - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \left\langle x^2 \right\rangle \\ &= \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

Unschärfe, Unsicherheit

$$\boxed{\Delta x = \sqrt{S} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte Zufällige Größe, deren Wertebereich kontinuierlich ist

Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Wertes x ist durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$ bestimmt

1. $0 \leq w(x)\, dx \leq 1$
2. $w(x) = \delta(x - x_0)$ d.h. x_0 tritt immer auf
3. $\int\limits_{-\infty}^{\infty} w(x)\, dx = 1$

$\Rightarrow$ Mittelwert: $\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x \cdot w(x)\, dx$ allg. $\langle f(x) \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\, w(x)\, dx$. Streuung und unsicherheit wie oben

2.4.2 Quantenmechanik

$$\underset{\text{Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte}}{\varrho(\vec{r}, t)} := |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Erwartungswert des Ortes

$$\begin{aligned}
\langle\vec{r}\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \vec{r}\varrho(\vec{r},t)\,d^3r \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \vec{r}\overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\,d^3r \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\vec{r}\psi(\vec{r},t)\,d^3r
\end{aligned}$$

Allgemein

$$\boxed{\langle f(\vec{r})\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,f(\vec{r})\,\psi(\vec{r},t)\,d^3r}$$

2.5 Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

2.5.1 Plausibilitätsbetrachtung

Freies Teilchen: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Allg. Lösung der Schrödingergleichung mit $\omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r},t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} f\left(\vec{k}\right) e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)} d^3k \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \int_{\tilde{R}^3} \tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3r
\end{aligned}$$

$\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) = f\left(\vec{k}\right) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}\cdot t}$

Umkehrung

$$\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r},t)\,e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r$$

Annahme: $\left|\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)\right|^2$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte für Wellenvektor $\vec{k}$

$\Rightarrow \left|\tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar},t\right)\right|^2$ ist Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Impuls

Es gilt $|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \Rightarrow \left|\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)\right|^2 = 1$

Denn:

Betrachte $f(\vec{r})$, $g(\vec{r})$ und ihre Fouriertransformierten $\tilde{f}\left(\vec{k}\right)$, $\tilde{g}\left(\vec{k}\right)$

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{f}(\vec{r})\,g(\vec{r})\,d^3r = \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{f}}\left(\vec{k}\right)\tilde{g}\left(\vec{k}\right) d^3k}$$

Parsewalsches Theorem

Beweis

$$\begin{aligned}
\text{LS} &= \int_{\mathbb{R}} \overset{\star}{f}(\vec{r})\, g(\vec{r})\, d^3r \\
&\underset{\text{Def. FT}}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{f}(\vec{r}) \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \tilde{g}\left(\vec{k}\right) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k \\
\text{RS} &= \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{f}}\left(\vec{k}\right) \tilde{g}\left(\vec{k}\right) d^3k \\
&\underset{\text{Def. FT}}{=} \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r \right)^{\star} \tilde{g}\left(\vec{k}\right) d^3k \\
&= \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{f}(\vec{r})\, \tilde{g}\left(\vec{k}\right) e^{+i\vec{k}\vec{r}} d^3 \cdot d^3r \\
&= \text{LS}
\end{aligned}$$

Mit $f = \psi$, $g = \psi$ folgt

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r}, t)\, \psi(\vec{r}, t)\, d^3r &= \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k}, t\right) \psi\left(\vec{k}, t\right) d^3r \\
\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2\, d^3r &= \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \left|\psi\left(\vec{k}, t\right)\right|^2 d^3r
\end{aligned}$$

und somit die gemeinsame Normierung

2.5.2 Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \left\langle \vec{k} \right\rangle = \hbar \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}} ...$$

, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

$$\begin{aligned}
d^3k = \frac{d^3p}{\hbar^3} \quad &= \hbar \int \overset{\star}{\tilde{\psi}} \left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{\vec{p}}{\hbar} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{d^3p}{\hbar^3} \\
&= \int \overset{\star}{\tilde{\psi}} \left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \vec{p} \tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) \frac{d^3p}{\hbar^3}
\end{aligned}$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{\tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right)}{\hbar^{\frac{3}{2}}}$$

„Wellenfunktion im Impulsraum“

$$\langle \vec{p} \rangle\, 0 \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\varphi}(\vec{p}, t)\, \vec{p} \varphi(\vec{p}, t)\, d^3r$$

Erwartungswert des Ortes

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi}(\vec{r}, t)\, \vec{r} \psi(\vec{r}, t)\, d^3r$$

Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \int_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k}, t\right) \vec{k} \tilde{\psi}\left(\vec{k}, t\right) d^3k$$

2.6 Impulsoperator

Frage: Lässt sich $\langle\vec{p}\rangle$ auch direkt im Ortsraum berechnen?

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r},t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)e^{i\vec{k}\vec{r}}d^3k \\
\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\vec{\nabla}\int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)e^{i\vec{k}\vec{r}}d^3k \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)i\vec{k}e^{i\vec{k}\vec{r}}d^3k
\end{aligned}$$

Da

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3}\overset{\star}{f}(\vec{r},t)\,g(\vec{r},t)\,d^3r = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\overset{\star}{\tilde{f}}\left(\vec{k},t\right)g\left(\vec{k},t\right)d^3k$$

folgt mit $f=\psi$, $\tilde{f}=\tilde{\psi}$, $g=\left(\vec{\nabla}\psi\right)_j$, $\tilde{g}=\left(i\vec{k}\tilde{\psi}\right)_j$, $j=1,2,3$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\int\limits_{\mathbb{R}^3}\overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\,d^3r &= \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k},t\right)i\vec{k}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)d^3k \\
&= \frac{1}{\hbar}\langle\vec{p}\rangle
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\langle\vec{p}\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3}\overset{\star}{\psi}(\vec{r},t)\,\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\,d^3r}$$

Idee: Impuls wird im „Ortsraum“ durch den <u>Operator</u> $\hat{\vec{p}}=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ dargestellt. Das ˆ deutet Operator-Charakter an.

$\hat{\vec{p}}$: Impulsoperator

Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$

In „Ortsdartsellung“ gilt $\hat{\vec{r}}=\vec{r}$

Lässt sich $\langle\vec{r}\rangle$ auch direkt aus $\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)$ berechnen?

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\psi(\vec{r},t)\,e^{-i\vec{k}\vec{r}}d^3r \\
\vec{\nabla}_{\vec{k}}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\psi(\vec{r},t)\,e^{-i\vec{k}\vec{r}}d^3r \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\psi(\vec{r},t)\,(-i\vec{r})\,e^{-i\vec{k}\vec{r}}d^3r
\end{aligned}$$

Dann folgt

$$\langle\vec{r}\rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3}\overset{\star}{\tilde{\psi}}\left(\vec{k},t\right)\left(-\frac{1}{i}\right)\vec{\nabla}_{\vec{k}}\tilde{\psi}\left(\vec{k},t\right)d^3k$$

Mit $\vec{p}=\hbar\vec{k}$, $\phi(\vec{p},t)=\frac{\tilde{\psi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar},t\right)}{\hbar^{\frac{3}{2}}}$, $\vec{\nabla}_{\vec{k}}=\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}$ folgt:

$$\boxed{\langle \vec{r} \rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\phi} (\vec{p}, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) \phi (\vec{p}, t) \, d^3 p}$$

Idee: Ort ist im „Impulsraum“ durch $\hat{\vec{r}} = -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}}$ gegeben. $\vec{\nabla}_{\vec{p}} = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$

Es gilt:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}^3} \overset{\star}{\phi} (\vec{p}, t) \, \vec{p} \phi (\vec{p}, t) \, d^3 p$$

$\Rightarrow \hat{\vec{p}} = \vec{p}$ in „Impulsdarstellung“

$\phi (\vec{p}, t)$: Wellenfunktion im Impulsraum

$\Rightarrow$ Quantenmechanische Erwartungswerte haben allgemein die Form

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \overset{\star}{\psi} (\vec{r}, t) \, \hat{O} \psi (\vec{r}, t) \, d^3 r$$

(Ortsdarstellung)

bzw.

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \int\limits_{\tilde{\mathbb{R}}} \overset{\star}{\phi} (\vec{p}, t) \, \hat{O} \phi (\vec{p}, t) \, d^3 p$$

(Impulsdarstellung)

Dabei bedeutet $\hat{O}$:

Physikalische Größe	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
Ort $\vec{r}$	$\vec{r}$	$-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} = i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}$
Impuls $\vec{p}$	$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right)$	$\vec{p}$
Drehimpuls $\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$	$\vec{r} \times \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\vec{r} \times \vec{\nabla} \right)$	$i\hbar \left(\vec{\nabla}_{\vec{p}} \times \vec{p} \right)$

Zentrale Idee für den Aufbau der Quantenmechanik:

Physikalische Größen werden durch Operatoren dargestellt

3 Allgemeine Prinzipien der Quantenmechanik

3.1 Schrödingergleichung

Bisher: freies Teilchen $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi (\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi (\vec{r}, t)$

Ebene Welle: $\psi (\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i \left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t \right)}$

LS:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = i\hbar \left(-i\omega \right) \psi = \underbrace{\hbar\omega}_{=\text{Energie } E} \psi (\vec{r}, t)$$

Da $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ folgt

$$\left(\hat{\vec{p}} \right)^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar \vec{\nabla}^2 = \left(\hat{p} \right)^2$$

folgt

$$\text{RS} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi (\vec{r}, t)$$

Klassische Mechanik

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\left(\vec{p} \right)^2}{2m}$$

3.1.1 Teilchen im Potential $V(\vec{r})$

Klassisch: $e = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$
Darstellung der Energie durch $\vec{p}$ und $\vec{r}$ entspricht Hamiltonfunktion

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

Freies Teilchen:

$$H(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{p^2}{2m}$$

Quantenmechanik

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\psi(\vec{r}, t)$$

$\hat{H}$: Hamiltonoperator

Schrödinger postulierte 1926, dass für ein freies Teilchen in einem Potential $V(\vec{r})$ die Wellenfunktion durch folgende Gleichung bestimmt wird

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) &= \hat{H}\psi(\vec{r}, t) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \end{aligned}}$$

Schrödingergleichung für Teilchen im Potential $V(\vec{r})$
$\hat{H}$; „Hamiltonoperator“
Der Hamiltonoperator ensteht aus der Hamiltonfunktion durch „Ersetzen“ der Koordinaten $\vec{r}$ und $\vec{p}$ durch Operatoren

$H(\vec{p}, \vec{r})$	$\longrightarrow$	$\hat{H}\left(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}\right)$
klassische Mechanik		Quantenmechanik
		(Ortsdarstellung $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$, $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$)

Dies gilt z.B. auch für zeitlich veränderliches Potential $V(\vec{r}, t) \Rightarrow$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)\right)\psi(\vec{r}, t)}$$

$\hat{H}$ kann folgende Formen annehmen

1. Abstrakte Darstellung: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$
2. Ortsdarstellung: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$
3. Impulsdarstellung: $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V\left(i\hbar\vec{\nabla}\vec{p}, t\right)$

Konzept:

1. Stelle Hamiltonfuntion H auf
2. Gehe von H zum Hamiltonoperator $\hat{H}$
3. Löse die Schrödingergleichung $\rightarrow \psi(\vec{r}, t)$
4. Berechne Erwartungswerte der physikalischen Größen

3.2 Operatoren und Kommutatoren

Operator $\hat{O}$:

$$\hat{O}\psi\left(\vec{r},t\right)=\varphi\left(\vec{r},t\right)$$

Operator „verändert“ die Funktion ψ nach φ

Beispiele

1. Impulsoperator $\hat{O}=\hat{\vec{p}}$: $\hat{\vec{p}}\psi\left(\vec{r},t\right)=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right)$
2. Ortsoperator $\hat{O}=\hat{\vec{r}}$: $\hat{\vec{r}}\psi\left(\vec{r},t\right)=\vec{r}\psi\left(\vec{r},t\right)$
3. Einheitsoperator $\hat{O}=\hat{1}$: $\hat{1}\psi\left(\vec{r},t\right)=\psi\left(\vec{r},t\right)$
4. Inversionsoperator $\hat{O}=\hat{I}$: $\hat{I}\psi\left(\vec{r},t\right)=\psi\left(-\vec{r},t\right)$
5. Translation um Vektor $\vec{d}$ $\hat{O}=\hat{T}_{\vec{d}}$: $\hat{T}_{\vec{d}}\psi\left(\vec{r},t\right)=\psi\left(\vec{r}+\vec{d},t\right)$

Achtung: in der Regel ist die Reihenfolge von Operatoren in Rechnungen wichtig

Klassisch: Ort x und Impuls p_x in x-Richtung $xp_x=p_xx\Rightarrow xp_x-p_xx=0$

Quantenmechanik:

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{p}_x\psi\left(\vec{r},t\right) &= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi\left(\vec{r},t\right)\\
\hat{p}_x\hat{x}\psi\left(\vec{r},t\right) &= \hat{p}_x\left(\hat{x}\psi\left(\vec{r},t\right)\right)\\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi\left(\vec{r},t\right)\right)\\
&= \frac{\hbar}{i}\psi\left(\vec{r},t\right)+\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\psi\left(\vec{r},t\right)
\end{aligned}$$

Operatoren wirken auf alles, was rechts von ihnen steht!

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi\left(\vec{r},t\right)-\hat{p}_x\hat{x}\psi\left(\vec{r},t\right)=-\frac{\hbar}{i}\psi\left(\vec{r},t\right)=i\hbar\psi\left(\vec{r},t\right)$$

$$\left(\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=i\hbar\psi\left(\vec{r},t\right)$$

Der Gehalt dieser Gleichung wird durch folgende Kurzschreibweise zum Ausdruck gebracht

$$\boxed{\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}=i\hbar}$$

Definition:

Für Operatorn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ bezeichnet man

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$$

als Kommutator von $\hat{A}$ und $\hat{B}$

Erinnerung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\psi\left(\vec{r},t\right)}_{\text{Wellenfkt. „Zustand"}}=\underbrace{\hat{H}}_{\text{Hamiltonoperator}}\psi\left(\vec{r},t\right)$$

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\left(\hat{\vec{r}},t\right)$$

Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{r}}=\vec{r}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

$$\hat{\vec{p}}=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}=\begin{pmatrix}\hat{p}_x\\\hat{p}_y\\\hat{p}_z\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}\\\frac{\partial}{\partial y}\\\frac{\partial}{\partial z}\end{pmatrix}$$

$$
\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar \\
[\hat{y}, \hat{p}_x] &= 0 \\
[\hat{y}, \hat{p}_y] &= i\hbar
\end{aligned}
$$

Denn

$$\hat{y}\hat{p}_x\psi(\vec{r},t) = y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r},t)$$

$$\hat{p}_x\hat{y}\psi(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(y\psi(\vec{r},t)\right) = \frac{\hbar}{i}y\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r},t)$$

$\Rightarrow$

$$\left(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}\right)\psi(\vec{r},t) = 0$$

$\Rightarrow$

$$[\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$$

3.2.1 Insgesamt

$$\left[\hat{\vec{r}}_j, \hat{\vec{p}}_k\right] = i\hbar\delta_{j,k}$$

mit $j, k = 1, 2, 3$

Vertauschungsrelation für Ort und Impuls

3.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

In einer Dimension:

$$\varrho(x,t) = \overset{\star}{\psi}(x,t)\,\psi(x,t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\psi(x,t) \tag{7}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\overset{\star}{\psi} = \overset{\star}{\hat{H}}\overset{\star}{\psi}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{V(x,t)}_{\text{reeles Potential}}\right)\overset{\star}{\psi}(x,t) \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\overset{\star}{\psi}(x,t)\right)\psi(x,t) + \overset{\star}{\psi}(x,t)\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

Mit (7) + (8)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t) &= \left(-\frac{1}{i\hbar}\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\overset{\star}{\psi}(x,t)\right)\psi(x,t)\right) \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar}\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\psi(x,t)\right)\overset{\star}{\psi}(x,t) \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(\overset{\star}{\psi}(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t) - \psi(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\overset{\star}{\psi}(x,t)\right)
\end{aligned}
$$

Da

$$\overset{\star}{\psi}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\overset{\star}{\psi}\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) - \frac{\partial\overset{\star}{\psi}}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$
$$\psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\overset{\star}{\psi} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi\frac{\partial}{\partial x}\overset{\star}{\psi}\right) - \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\overset{\star}{\psi}}{\partial x}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi\frac{\partial}{\partial x}\overset{\star}{\psi} - \overset{\star}{\psi}\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$\frac{\partial\varrho\left(r,t\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\frac{\hbar}{i2m}\left(\overset{\star}{\psi}\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\overset{\star}{\psi}\right)}_{j(x,t)\text{ Wahrscheinlichkeitsstromdichte}} = 0$$

$$\boxed{\frac{\partial\varrho\left(x,t\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}j\left(x,t\right) = 0}$$

Kontinuitätsgleichung

In drei Dimensionen:

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial\varrho\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j}\left(\vec{r},t\right) = 0\\ \vec{j}\left(\vec{r},t\right) = \frac{\hbar}{i2m}\left(\overset{\star}{\psi}\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right) - \psi\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\overset{\star}{\psi}\left(\vec{r},t\right)\right)\end{gathered}}$$

3.3.1 Physikalische Bedeutung

Eindemensional:

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho\left(x,t\right) = -\frac{\partial}{\partial x}j\left(x,t\right)$$

Interpretation:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b\varrho\left(x,t\right)dx = -\int_a^b\frac{\partial}{\partial x}j\left(x,t\right)dx = j\left(a,t\right) - j\left(b,t\right)$$

(Abb Q11)

In drei Dimensionen

$$\frac{\partial\varrho\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = -\mathrm{div}\vec{j}\left(\vec{r},t\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V\varrho\left(\vec{r},t\right)d^3r = -\int_V\mathrm{div}j\left(\vec{r},t\right)d^3r = -\oint_{\text{OF um }V}\vec{j}\left(\vec{r},t\right)\cdot d\vec{f}$$

(Abb Q12)

3.4 Stationäre Schrödingergleichung

Sei $\hat{H}$ zeitunabhängig (also $V(\vec{r})$ hängt nicht von t ab)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

Separationsansatz:

$$\psi(\vec{r},t) = f(t)\,\varphi(\vec{r})$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}f(t)\right)\varphi(\vec{r}) = f(t)\,\hat{H}\varphi(\vec{r}) \mid : f(t)\,\varphi(\vec{r})$$

Sei $f(t) \neq 0$, $\varphi(\vec{r}) \neq 0$

$$\frac{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}$$

Soll für alle t, $\vec{r}$ gelten $\Rightarrow$

$$\frac{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t)}{f(t)} = \underbrace{E}_{\text{Konstante mit Dimension Energie}} = \frac{\hat{H}\varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t) = Ef(t) \tag{9}$$

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \tag{10}$$

Stationäre Schrödingergleichung

gilt auch falls $f(t) = 0$ bzw. $\varphi(\vec{r}) = 0$

(9) ist direkt lösbar:

$$f(t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t}\,(\cdot\text{Konstante}) \tag{11}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\psi(\vec{r},t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t}\cdot\varphi(\vec{r})}$$

3.4.1 Hinweis

Häufig wird die Wellenfunktion $\varphi(\vec{r})$ auch mit $\psi(\vec{r})$ bezeichnet

$$\boxed{\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})}$$

Im allgemeinen Fall ergibt sich die Lösung von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$ aus einer Überlagerung von Lösungen des „Types (11)“

3.4.2 Stationäre Schrödingergleichungen

$$\hat{H}\varphi_n(\vec{r}) = \underbrace{E_n}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{\varphi_n(\vec{r})}_{\text{Eigenfunktion}}$$

Eigenwertgleichung

n: Index, der die verschiedenen Lösungen der Gleichung „abzählt“

n wird als Quantenzahl bezeichnet

3.4.3 Beispiel Freies Teilchen

1. Eindimensional: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) &= E\varphi(x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \varphi(x) = Ae^{ikx}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

$\rightarrow$ Quantenzahl $\hat{=}\, k$

$$\boxed{\begin{aligned} E_k &= \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \\ \varphi_k(x) &= Ae^{ikx} \end{aligned}}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= e^{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t\frac{1}{i\hbar}} \cdot Ae^{ikx} \\ &= Ae^{ikx}e^{-i\underbrace{\frac{\hbar k^2}{2m}}_{=\omega}t} \\ &= Ae^{i(kx-\omega t)} \end{aligned}$$

2. Dreidimensional $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}$

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= Ae^{i\vec{k}\vec{r}} \\ E_{\vec{k}} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ k^2 &= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \end{aligned}$$

Quantenzahlen $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$

Falls Eigenwerte $E_m = E_{m'}$ übereinstimmen, aber die zugehörigen Eigenfunktionen $\varphi_m(\vec{r})$ und $\varphi_{m'}(\vec{r})$ unterschiedlich sind, so liegt eine „Entartung“ vor

$$E_m = E_{m'} \quad , \quad \varphi_m(\vec{r}) \neq \varphi_{m'}(\vec{r})$$

3.5 Potentialtopf mit unendlich hoher Wahrscheinlichkeit

Eindimendionales System $\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+V\left(x\right)$

(Abb Q13)

$V_0\rightarrow\infty$: Das Teilchen hält sih nur im Breich II auf

$\Rightarrow\varphi^{\mathrm{I}}\left(x\right)=0$, $\varphi^{\mathrm{III}}\left(x\right)=0$

3.5.1 Forderung an Wellenfunktion

- $\varphi\left(x\right)$ stetig (damit $\varphi'\left(x\right)$ definiert)
- $\varphi'\left(x\right)$ stetig (damit $\varphi''\left(x\right)$ definiert)

Gilt dies auch bei Unstetigkeitsstellen des Potentials?

- $\varphi\left(x\right)$ stetig
- $\varphi'\left(x\right)$ stetig bei endlichen Sprüngen von $V\left(x\right)$

Stetigkeit

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\varphi^{\mathrm{II}}\left(0\right) &= \varphi^{\mathrm{I}}\left(0\right)=0\\ \varphi^{\mathrm{II}}\left(L\right) &= \varphi^{\mathrm{III}}\left(L\right)=0\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\varphi^{\mathrm{II}}\left(0\right)=\varphi^{\mathrm{II}}\left(L\right)$$

Schrödingergleichung im Bereich II

$V\left(x\right)=0\Rightarrow\hat{H}^{\mathrm{II}}=\frac{p_x^2}{2m}$

$\hat{H}^{\mathrm{II}}\varphi^{\mathrm{II}}\left(x\right)=E\varphi^{\mathrm{II}}\left(x\right)$

$\Rightarrow$ Lösungen $\varphi\left(x\right)\sim e^{ikx}$ oder e^{-ikx}

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\varphi^{\mathrm{II}}\left(x\right) &= ae^{ikx}+be^{-ikx}\\ \varphi^{\mathrm{II}}\left(0\right) &= a\cdot1+b\cdot1\overset{!}{=}0\Rightarrow a=-b\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\varphi^{\mathrm{II}}\left(x\right) &= a\left(e^{ikx}-e^{-ikx}\right)\\ \varphi^{\mathrm{II}}\left(x\right) &= 2ai\sin kx\end{aligned}$$

$x=L$

$$\varphi^{\mathrm{II}}\left(L\right)=2ai\sin\left(kL\right)\overset{!}{=}0$$

$\Rightarrow$

$$kL = n\pi$$

$\Rightarrow$

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2} \cdot n^2}$$

$E_n \sim n^2$, $n = 1, 2, 3, ...$