

## Teil I

# Einführung in die Quantenmechanik

## 1 Teilchen und Wellen

### 1.1 Klassische Physik

#### 1.1.1 Mechanik (Teilchentheorie)

(Abb 1)

Newton:

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

#### 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.

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

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

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

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

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

„Einfache“ Lösung: „ebene Welle“

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

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

Wellenpaket

#### 1.1.3 Wellencharakter

- Beugung
- Brechung
- Interferenz

#### 1.1.4 Bemerkungen

- $\vec{\mathcal{E}}$ -Feld als ebene Welle  $\rightarrow \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\omega} (\vec{k} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t))$

- Allgemein:

Energie des Feldes im Volumen  $V$

$$E = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V \left| \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r + \frac{1}{\mu_0} \frac{1}{2} \int_V \left| \vec{B}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r$$

Ebene Welle:  $E = \epsilon_0 \int_V \left| \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r$

„Energie ist proportional zu  $\left| \vec{\mathcal{E}} \right|^2$ “

Impuls eines elektromag. Feldes

$$\vec{P}_{Feld} = \epsilon_0 \int_V \left( \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right) d^3r$$

Ebene Welle:  $\vec{P}_{Feld} = \frac{\vec{k}}{\omega} \epsilon_0 \int_V \mathcal{E}^2(\vec{r}, t) d^3r$

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

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

$\nu$ : 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  $E = h\nu \cdot n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) abgegeben

„Quantenhypothese von Max Planck“

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

**Photoeffekt (1905)** (Abb 3)

Energie pro Elektron

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

- Zahl der emittierten Elektronen 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 Anzahl der emittierten Elektronen

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

$P$  von Photon:

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

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)

$|\text{Zentrifugalkraft}| = |\text{Coulombkraft}|$

$$\frac{mv^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (1)$$

Energie:  $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

Probleme:

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

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

$$\Rightarrow E_n = - \underbrace{\frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}}_{13,6059\text{eV}} \frac{1}{n^2}$$

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

## 1.3 Materiewellen

Problem: Klassische Physik beschreibt „Mikrowelt“ nicht genau

Stand der Physik 1923

	Licht	Materie
„klassische“ Experimente	Bei Ausbreitung <u>Wellencharakter</u> → Maxwell-Gl	Makroskopische Körper: <u>Teilchencharakter</u> → Newton-Gl
„nicht klassische“ Experimente	Bei Emission und Absorption: <u>Teilchencharakter</u> $E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}$	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:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Hypothese von de Broglie

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

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

Ausbreitungsgeschwindigkeit

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

## 2 Wellenmechanik des freien Teilchens

### 2.1 Wellengleichung

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

Freies Teilchen

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

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

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

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

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

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

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

⇒

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Idee: Wellenpaket beschreibt Teilchen

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

## 2.2 Wellenpaket

### 2.2.1 Eindimensional

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

(Abb 5)

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

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

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

Also:

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{\gamma}} e^{-i\frac{x^2}{2\gamma^2}} \cdot e^{ik_0 x}$$

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

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

Bei  $t = 0$ :

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

$$\Rightarrow f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

(Umkehrung der Fouriertransformation)

### 2.2.2 Hilfsintegral

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

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)

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

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

$\psi \sim$  Normierungsfaktor Gausfunktion: Ebene Welle

(Abb 7)

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

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

### 2.2.3 Breite $B$ des Wellenpakets

(Abb 8)

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

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

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

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

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

(Abb 9)

→ Wellenpaket läuft auseinander

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

Widerspruch zu experimenteller Erfahrung

Idee: Born

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

1. Elektron:  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ , Radius:  $r = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ ,  $\gamma = r$   
 $T = 6,8 \cdot 10^{-23} \text{ s}$
2. Bleikugel:  $m = 0,1 \text{ g}$ ,  $r = 1,3 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ ,  $\gamma = r$   
 $T = 1,6 \cdot 10^{+24} \text{ s} = 5,1 \cdot 10^{16} \text{ Jahre}$

## 2.3 Bedeutung der Wellenfunktion

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

### 2.3.1 Doppelspaltexperiment

(Abb 10)

(Folie Internet)

„Auftrittspunkte“ einzelner Photonen sind zufällig.

Viele Photonen  $\rightarrow$  regelmäßiges Beugungsbild

Auftreffen erfolgt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

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

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

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

### 2.3.3 Periodische Funktion

Normierung auf Volumen  $V$

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

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

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

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

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

### 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“  $\Rightarrow$  Kenntnis 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  $X_1, X_2, \dots, X_N$  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.  $\sum_{i=1}^N w_i = 1$  (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

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

#### Unschärfe, Unsicherheit

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

**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.  $\int_{-\infty}^{\infty} w(x) dx = 1$

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

### 2.4.2 Quantenmechanik

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

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte



Erwartungswert des Ortes

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

Allgemein

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

## 2.5 Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

### 2.5.1 Plausibilitätsbetrachtung

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

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

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

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

**Umkehrung**

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

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

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

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

Denn:

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

$$\int_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{f}^*(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k}) d^3 k$$

Parsewalsches Theorem

## Beweis

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

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

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

und somit die gemeinsame Normierung

### 2.5.2 Erwartungswert des Impulses

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \langle \vec{k} \rangle = \hbar \int_{\mathbb{R}^3}^{\star} \tilde{\psi} \dots$$

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

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

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

„Wellenfunktion im Impulsraum“

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

Erwartungswert des Ortes

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

Erwartungswert des Impulses

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

## 2.6 Impulsoperator

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

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

Da

$$\int_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r}, t) g(\vec{r}, t) d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{f}^*(\vec{k}, t) g(\vec{k}, t) d^3k$$

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

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) d^3r &= \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}^*(\vec{k}, t) i\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) d^3k \\ &= \frac{1}{\hbar} \langle \vec{p} \rangle\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) d^3r$$

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

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

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

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

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

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

Dann folgt

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

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

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(\vec{p}, t) \left( -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

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:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

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

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

$\Rightarrow$  Quantenmechanische Erwartungswerte haben allgemein die Form

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

(Ortsdarstellung)

bzw.

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \phi^*(\vec{p}, t) \hat{O} \phi(\vec{p}, t) d^3 p$$

(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 $\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}$	$\vec{r} \times \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) = \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla})$	$i\hbar (\vec{\nabla}_{\vec{p}} \times \vec{p})$

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

LS:

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

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

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

folgt

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

Klassische Mechanik

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

### 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

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

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

$\hat{H}$ ; „Hamiltonoperator“

Der Hamiltonoperator entsteht aus der Hamiltonfunktion durch „Ersetzen“ der Koordinaten  $\vec{r}$  und  $\vec{p}$  durch Operatoren

$$\begin{array}{ccc} H(\vec{p}, \vec{r}) & \longrightarrow & \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}) \\ \text{klassische Mechanik} & & \text{Quantenmechanik} \\ & & (\text{Ortsdarstellung } \hat{\vec{r}} = \vec{r}, \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) \end{array}$$

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

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

$\hat{H}$  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:  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(i\hbar \vec{\nabla} \vec{p}, t)$

**Konzept:**

1. Stelle Hamiltonfunktion  $H$  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  $\hat{O}$ :

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

Operator „verändert“ die Funktion  $\psi$  nach  $\varphi$

Beispiele

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

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

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

Quantenmechanik:

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

Operatoren wirken auf alles, was rechts von ihnen steht!

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

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

Der Gehalt dieser Gleichung wird durch folgende Kurzschreibweise zum Ausdruck gebracht

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

Definition:

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

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

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

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