

## 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“

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

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

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

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

- 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 Fouriertransformierten  $\tilde{f}(\vec{k})$ ,  $\tilde{g}(\vec{k})$

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

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  $\vec{d}$ :  $\hat{O} = \hat{T}_{\vec{d}}$ :  $\hat{T}_{\vec{d}}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r} + \vec{d}, t)$

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

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

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  $\hat{B}$

**Erinnerung**

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

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

**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

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

### 3.2.1 Insgesamt

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

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

Vertauschungsrelation für Ort und Impuls

## 3.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

In einer Dimension:

$$\varrho(x, t) = \psi^*(x, t) \psi(x, t)$$

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

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

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

Mit (7) + (8)

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

Da

$$\begin{aligned}\psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \\ \frac{\partial \varrho(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\frac{\hbar}{i2m} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right)}_{j(x, t) \text{ Wahrscheinlichkeitsstromdichte}} &= 0\end{aligned}$$

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

Kontinuitätsgleichung

In drei Dimensionen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, t) &= 0 \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{i2m} \left( \psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right)\end{aligned}$$

### 3.3.1 Physikalische Bedeutung

Eindimensional:

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

Interpretation:

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

(Abb Q11)

In drei Dimensionen

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

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

(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:

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

$\Rightarrow$

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

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  $\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

Stationäre Schrödingergleichung

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

(9) ist direkt lösbar:

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

$\Rightarrow$

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

#### 3.4.1 Hinweis

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

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$

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

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

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

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

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

Eindimensionales System  $\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$

(Abb Q13)

$V_0 \rightarrow \infty$ : Das Teilchen hält sich nur im Bereich II auf

$$\Rightarrow \varphi^{\text{I}}(x) = 0, \varphi^{\text{III}}(x) = 0$$

#### 3.5.1 Forderung an Wellenfunktion

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

Gilt dies auch bei Unstetigkeitsstellen des Potentials?

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

Stetigkeit

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\varphi^{\text{II}}(0) = \varphi^{\text{II}}(L)$$

Schrödingergleichung im Bereich II

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

$$\hat{H}^{\text{II}}\varphi^{\text{II}}(x) = E\varphi^{\text{II}}(x)$$

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

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\varphi^{\text{II}}(x) &= ae^{ikx} + be^{-ikx} \\ \varphi^{\text{II}}(0) &= a \cdot 1 + b \cdot 1 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow a = -b\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

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

$$x = L$$

$$\varphi^{\text{II}}(L) = 2ai \sin(kL) \stackrel{!}{=} 0$$

$\Rightarrow$

$$kL = n\pi$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

### Erinnerung

(Abb Q13)

$$\varphi^{\text{I}}(x) = 0 = \varphi^{\text{III}}(x)$$

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$\varphi^{\text{II}}(0) = 0 = \varphi^{\text{II}}(L); \text{ im Bereich II: } V(x) = 0$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \varphi(x) = e^{ikx} \text{ bzw. } \varphi(x) = e^{-ikx}$$

Linearkombinationen der Lösung  $\rightarrow$  erfüllen der Randbedingungen

$$\varphi(x) = ae^{ikx} + b^{-ikx}$$

$$\text{Rand: } \varphi(0) = a + b \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow a = -b \Rightarrow$$

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

$$\text{Rand: } \varphi(L) = 2ai \sin(kL) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} kL &= n\pi \quad n: \text{ganze Zahl} \\ k &= \frac{n\pi}{L} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Im gesamten Gebiet:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 2ai \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Normierung:  $A = 2ai$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

$\Rightarrow$

$$\int_0^L \left| A \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) \right|^2 dx \stackrel{!}{=} 1$$

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi}{L}nx\right) dx \stackrel{!}{=} 1$$

$$|A|^2 \left( \frac{L}{2} - 0 \right) \stackrel{!}{=} 1$$

$$\text{da } \int \sin^2(\alpha x) dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4\alpha} \sin(2\alpha x)$$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \underbrace{\text{Phasenfaktor}}_{=e^{i\vartheta}, \vartheta \text{ reel}}$$

Typischerweise wählt man als Phasenfaktor den Wert „Eins“

$$\varphi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) & 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$n = 0$  ausgeschlossen, da  $\varphi_0(x) = 0 \hat{=}$  physikalisch nicht sinnvoll

$n = -1, -2, \dots$ :  $\sin\left(\frac{\pi}{L}(-n)x\right) = -\sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right)$ ,  $\varphi_{-n}(x) = -\varphi_n(x)$ . d.h.  $\varphi_{-n}(x)$  und  $\varphi_n(x)$  stimmen bis auf Phasenfaktor überein

$$\hat{H}\varphi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_n(x) \stackrel{!}{=} E_n \varphi_n$$

Bereich II:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{\pi}{L} n\right)^2 (-) \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \\ &\stackrel{!}{=} E_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

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

### 3.5.2 Grafische Darstellung der Resultate

(Abb Q14)

Oft findet man folgende Darstellung:

(Abb Q15)

### 3.5.3 Physikalische Aspekte

- Eigenzustände können (im Potentialtopf) nur bestimmte Energien haben (diskretes Energiespektrum)
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist räumlich nicht konstant
- In allen Zuständen  $\varphi_n$  ist das Teilchen mit der größten Wahrscheinlichkeit in der Mitte des Topfes ( $x = \frac{L}{2}$ ) zu finden:  $\langle x \rangle = \frac{L}{2}$
- Erwartungswert des Impulses:  $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$

### 3.5.4 Formale Aspekte

**1. Orthogonalität** Skalarprodukt zwischen Funktionen  $\varphi(x)$  und  $\chi(x)$

$$(\chi, \varphi) := \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \varphi(x) dx$$

(Analog zu  $\vec{b} \cdot \vec{a} = \sum_{j=1}^n b_j^* a_j$  mit  $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots)$ ,  $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots)$ )

$$(\chi, \varphi) = 0 \Rightarrow \text{Funktionen sind „orthogonal“}$$

Hier:

$$\begin{aligned} (\varphi_n, \varphi_{n'}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx \\ &= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n' x\right) dx \\ &= \delta_{n,n'} \text{ (analog zu Fourierreihen)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Eigenfunktionen sind orthogonal

**2. Vollständigkeit** Jede Funktion  $f(x)$  mit  $f(0) = 0$  und  $f(L) = 0$  kann durch die  $\varphi_n(x)$  dargestellt werden

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)$$

$c_n$ : Entwicklungskoeffizient (analog zu Fourierdarstellung)

### 3.5.5 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für Potentiale

Bisher:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x) \quad \text{mit } \hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n \\ &\quad \text{stationäre Zustände} \\ \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 &= \underbrace{e^{-\frac{E_n t}{i\hbar}} e^{\frac{E_n t}{i\hbar}}}_{=1} \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) \\ &= |\varphi_n(x)|^2 \quad \text{unabhängig von } t \end{aligned}$$

Allgemein

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$$

erfüllt

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

### 3.5.6 Beispiel

Wellenpaket

(Abb Q16)

Teilchen ist bei  $x = \frac{L}{2}$  lokalisiert

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} b^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{(x - \frac{L}{2})^2}{2b^2}} e^{ik_0(x - \frac{L}{2})}$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \psi(x, t) dx &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \varphi_n(x) dx}_{=\delta_{n,n'}} \\ &= c_{n'} e^{\frac{E_{n'} t}{i\hbar}} \end{aligned}$$

$t = 0$ :

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n'}^*(x) \psi(x, 0) dx$$

Mit:  $\sin \beta x = \frac{1}{2i} (e^{i\beta x} - e^{-i\beta x})$  und  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} e^{i\beta x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}$  für reelle  $\alpha > 0$

Dann gilt:

$$c_n = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \sqrt{b} \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{L}} \sqrt{2\pi} \left( e^{ik_0 \frac{L}{2}} e^{-(k_0 + k_n)^2 \frac{b^2}{2}} + e^{-ik_0 \frac{L}{2}} e^{-(-k_0 + k_n)^2 \frac{b^2}{2}} \right)$$

mit  $k_n = \frac{n\pi}{L}$

Insgesamt:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right) \cdot e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 t}$$

(Folie  $|\psi(x, t)|^2$  für Teilchen im Potentialtopf)

Klassisch:

(Abb Q17)

### 3.6 Dreidimensionale Separable Potentiale

Schrödinger-Gleichung  $\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$

Separables Potential:  $V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \left( \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right)}_{\hat{H}_1(x)} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right)}_{\hat{H}_2(y)} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right)}_{\hat{H}_3(z)} \right) \varphi(\vec{r}) &= E \varphi(\vec{r}) \\ \left( \hat{H}_1(x) + \hat{H}_2(y) + \hat{H}_3(z) \right) &= E \varphi(\vec{r}) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Separationsansatz:  $\varphi(\vec{r}) = f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$

## Einsetzen

$$\begin{aligned} \left( \hat{H}_1(x) f(x) \right) g(y) h(z) + \left( \hat{H}_2(y) g(y) \right) f(x) h(z) + \left( \hat{H}_3(z) h(z) \right) f(x) g(y) &= E f(x) g(y) h(z) \quad | : f(x) g(y) h(z) \\ \frac{\hat{H}_1(x) f(x)}{f(x)} + \frac{\hat{H}_2(y) g(y)}{g(y)} + \frac{\hat{H}_3(z) h(z)}{h(z)} &= E \end{aligned}$$

Soll für alle  $x, y, z$  gelten  $\Rightarrow$  Terme sind alle konstant

$$E^{(x)} + E^{(y)} + E^{(z)} = E$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(x) f_{n_x}(x) &= E^{(x)} f_{n_x}(x) \\ \hat{H}_2(y) g_{n_y}(y) &= E^{(y)} g_{n_y}(y) \\ \hat{H}_3(z) h_{n_z}(z) &= E^{(z)} h_{n_z}(z) \end{aligned}$$

$n_x, n_y, n_z$ : Quantenzahlen

Eigenzustände von  $\hat{H}(\vec{r})$  haben die Form

$$\varphi_{n_x, n_y, n_z}(\vec{r}) = f_{n_x}(x) g_{n_y}(y) h_{n_z}(z)$$

Energien:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n_x}^{(x)} + E_{n_y}^{(y)} + E_{n_z}^{(z)}$$

Dann ist es notwendig drei eindimensionale Schrödinger-Gleichungen zu lösen.

### 3.6.1 Beispiel: Potentialrinne

(Abb Q18)

$V_0 \rightarrow \infty$

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ V_0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\hat{=}$

- Teilchen ist in  $x$ -Richtung im Topf von 0 bis  $L$  eingesperrt
- Freies Teilchen in  $y$ - und  $z$ -Richtung

#### $x$ -Richtung

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x) \\ V_1(x) &= \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ V_0 & \text{sonst} \end{cases} \\ f(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} x n_x\right) \\ E_{n_x}^{(x)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n_x^2 \end{aligned}$$



**y-Richtung**

$$\begin{aligned} V_2(y) &= 0 \\ \hat{H}_2(y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\ g_{k_y}(y) &= N_y e^{ik_y y} \\ E_{k_y}^{(y)} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 \end{aligned}$$

Quantenzahl  $-\infty \leq k_y \leq \infty$

$N_y$ : Normierungsfaktor

**z-Richtung** analog

$$\begin{aligned} h_{k_z}(z) &= N_z e^{ik_z z} \\ E_{k_z}^{(z)} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} \varphi_{n_x, k_y, k_z}(\vec{r}) &= N \sin\left(\frac{\pi}{L} x n_x\right) e^{ik_y y} e^{ik_z z} \\ E_{n_x, k_y, k_z} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 n_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \right) \end{aligned}$$

$N$ : Normierungsfaktor

$n_x = 1, 2, 3, \dots, -\infty \leq k_y \leq \infty, -\infty \leq k_z \leq \infty$

Ein solches Potential tritt näherungsweise bei Halbleiterquantenstrukturen auf

(Abb Q19)

### 3.7 Hermitesche Operatoren

Skalarprodukt zwischen  $\chi(\vec{r})$  und  $\hat{O}\varphi(\vec{r})$

$\hat{O}$ : Operator

$$\left( \chi(\vec{r}), \hat{O}\varphi(\vec{r}) \right) \equiv \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O}\varphi(\vec{r}) d^3r$$

$\chi(\vec{r}), \varphi(\vec{r})$ : differenzierbar und quadratintegrabel (oder periodisch)

#### 3.7.1 Adjungierter Operator $\hat{O}^+$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \chi^*(\vec{r}) \hat{O}\varphi(\vec{r}) d^3r \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \left( \hat{O}^+ \chi(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) d^3r$$

$\hat{O}^+$  ist der zu  $\hat{O}$  adjungierte Operator

Also

$$\left( \chi, \hat{O}\varphi \right) = \left( \hat{O}^+ \chi, \varphi \right)$$

**Beispiel**  $\hat{O} = \frac{d}{dx}$  (eindimensional)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \hat{O} \varphi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\chi^*(x)}_u \underbrace{\frac{d}{dx} \varphi(x)}_{v'} dx \\ \text{partielle Integration} &= \underbrace{\left[ \underbrace{\chi^*(x)}_u \underbrace{\varphi(x)}_v \right]_{-\infty}^{\infty}}_0 - \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left( \frac{d}{dx} \chi^*(x) \right)}_{u'} \underbrace{\varphi(x)}_v dx \end{aligned}$$

$\chi^*(\infty) = \chi^*(-\infty) = 0$ ,  $\varphi(\infty) = \varphi(-\infty) = 0$ , da  $\chi, \varphi$  quadratintegrabel

$\Rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{d}{dx} \chi^*(x) \right) \varphi(x) dx$$

Also

$$\hat{O}^+ = -\frac{d}{dx}$$

### 3.7.2 Speziell

$$\hat{O} = \hat{O}^+$$

Selbstadjungierter Operator (hermitescher Operator)

Diese Operatoren sind in der Quantenmechanik von besonderer Bedeutung

(Hermitescher Operator: Definitionsbereich von  $\hat{O}$  und  $\hat{O}^+$  können unterschiedlich sein)

### Beispiele

1. Ortsoperator  $\hat{r}$

$$\int \chi^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi(\vec{r}) d^3r = \int (\vec{r} \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r$$

$$\Rightarrow \hat{r}^+ = \hat{r} \text{ (hermitescher Operator)}$$

2. Impulsoperator

eindimensional:  $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{\hat{p}_x} \varphi(x) dx &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{d}{dx} \chi(x) \right)^* \varphi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{\hat{p}_x^+} \chi(x) \right)^* \varphi(x) dx \end{aligned}$$

$\hat{p}_x^+ = \hat{p}_x \Rightarrow \hat{p}_x$  ist ein hermitescher Operator

Analog  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$  ist ebenfalls hermitesch

3. Aus  $\hat{O}$  hermitesch folgt  $\hat{O}^2$  ist ebenfalls hermitesch:

$$\begin{aligned}
 \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O}^2 \varphi(\vec{r}) d^3r &= \int \chi^*(\vec{r}) \hat{O} (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^+ \chi(\vec{r}))^* (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O} \chi(\vec{r}))^* (\hat{O} \varphi(\vec{r})) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^+ \hat{O} \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &= \int (\hat{O}^2 \chi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\hat{O}^2)^+ = \hat{O}^2$$

$\Rightarrow \hat{p}^2$  ist hermitesch (da  $\hat{p}$  hermitesch ist)

$V(\vec{r})$  ist auch hermitesch  $\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$  ist ein hermitescher Operator

### 3.7.3 Eigenschaften hermitescher Operatoren

#### Erwartungswerte

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{O} \rangle &= \int \varphi^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &\stackrel{\text{da } \hat{O}^+ = \hat{O}}{=} \int (\hat{O} \varphi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d^3r \\
 &= \int \varphi(\vec{r}) (\hat{O} \varphi(\vec{r}))^* d^3r \\
 &= \left( \int \varphi^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi(\vec{r}) d^3r \right)^* \\
 &= (\langle \hat{O} \rangle)^*
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \langle \hat{O} \rangle$  ist reell

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind immer reell

#### Eigenwerte

$$\begin{aligned}
 \hat{O} \varphi_n(\vec{r}) &= \lambda_n \varphi_n(\vec{r}) \\
 \underbrace{\int \varphi_n^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi_n(\vec{r}) d^3r}_{\text{reell}} &= \lambda_n \underbrace{\int \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) d^3r}_{\underbrace{\int |\varphi_n(\vec{r})|^2 d^3r}_{\text{reell}}}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \lambda_n$  reell

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind immer reell

#### Orthogonalität der Eigenfunktionen

$$\begin{aligned}
 \hat{O} \varphi_1(\vec{r}) &= \lambda_1 \varphi_1(\vec{r}) \\
 \hat{O} \varphi_2(\vec{r}) &= \lambda_2 \varphi_2(\vec{r}) \\
 \varphi_1(\vec{r}) &\neq \varphi_2(\vec{r})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I &= \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{O}\varphi_1(\vec{r})}_{\lambda_1 \varphi_1(\vec{r})} d^3r = \lambda_1 \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r \\
&= \int \left( \underbrace{\hat{O}\varphi_2(\vec{r})}_{\lambda_2 \varphi_2(\vec{r})} \right)^* \varphi_1(\vec{r}) d^3r = \underbrace{\lambda_2^*}_{=\lambda_2} \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r
\end{aligned}$$

### Fallunterscheidung

1.  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  also keine Entartung  
 $\Rightarrow \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r = 0$   
d.h.  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  sind „Orthogonal“  
allg.  $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$

$$\int \tilde{\varphi}_{n'}^* \varphi_n(\vec{r}) d^3r = \delta_{n,n'}$$

2.  $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$  „Entartung“  
 $\Rightarrow \chi = c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})$  ist Eigenfunktion  
 $\hat{O}\chi = c_1 \hat{O}\varphi_1(\vec{r}) + c_2 \hat{O}\varphi_2(\vec{r}) = \lambda (c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})) = \lambda \chi(\vec{r})$   
Wähle dabei:

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_1(\vec{r}) &= \varphi_1(\vec{r}) \\
\tilde{\varphi}_2(\vec{r}) &= \left( \varphi_2(\vec{r}) - \varphi(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r \right) \cdot \underbrace{N_2}_{\text{Normierungsfaktor}}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \tilde{\varphi}_2(\vec{r}) d^3r &= \left( \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r - \underbrace{\int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) d^3r}_{=1, \text{ da } \varphi_1 \text{ normiert}} \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r \right) N_2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

Analog bei drei entarteten Eigenwerten  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 \equiv \lambda$

$$\tilde{\varphi}_3 = N_3 \left( \varphi_3(\vec{r}) - \tilde{\varphi}_2(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_2^*(\vec{r}) \varphi_3(\vec{r}) d^3r - \tilde{\varphi}_1(\vec{r}) \int \tilde{\varphi}_1^*(\vec{r}) \varphi_3(\vec{r}) d^3r \right)$$

$\Rightarrow$

Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind orthogonal zueinander (wählbar)

$\hat{=}$

$$\int \tilde{\varphi}_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) d^3r = \delta_{n,n'}$$

Orthogonalsystem von Eigenfunktionen

### Beispiele

- Teilchen im Potentialtopf: Quantenzahl  $n \hat{=}$  ganze Zahl (diskretes Spektrum)
- Freie Teilchen: Quantenzahl  $k \hat{=}$  reelle Zahl (kontinuierliches Spektrum)

z.B. in einer Dimension

$$\begin{aligned}\varphi_k(x) &= N e^{ikx} \\ \varphi_{k'}(x) &= N e^{ik'x}\end{aligned}$$

Es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ik'x} dx = 2\pi \delta(k - k')$$

Wähle  $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow$

$$\int \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) dx = \delta(k - k')$$

„Normierung auf  $\delta$ -Funktion“

Analog in drei Dimensionen:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$\Rightarrow$

$$\int \varphi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}'}(\vec{r}) d^3r = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$$

### 3.8 Vollständiges Orthogonalsystem (VONS)

$f(\vec{r})$  Funktion, die mit Randbedingungen verträglich ist

$f(\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$  ist beliebig genau darstellbar bzw.  $f(\vec{r}) = \int c_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3k$

Typischerweise sind Funktionensysteme der in der Quantenmechanik auftretenden hermiteschen Operatoren vollständig.

### 3.9 Postulate der Quantenmechanik

1. Für jedes physikalische System existiert eine Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$ .  $\psi(\vec{r}, t)$  beschreibt den „Zustand“ des Systems. In  $\psi(\vec{r}, t)$  steckt unsere gesamte Information über das System.
2. Physikalisch beobachtbare Größen (Observable) werden durch hermitesche Operatoren dargestellt.
3. Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion wird durch die Schrödinger-Gleichung

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

beschrieben.

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  ergibt sich aus der Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik durch Ersetzen der Observablen durch hermitesche Operatoren.

## 4 Anwendungen der Quantenmechanik in einer Dimension

### 4.1 Stetigkeit der Wellenfunktion

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x)}_{\varphi''(x)} + V(x) \varphi(x) \right) = E \varphi(x)$$

Was gilt für die Stetigkeit von  $\varphi(x)$  und  $\varphi'(x)$ , wenn  $V(x)$  unstetig ist?

(Abb Q 20)

$$\varphi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \varphi(x)$$

Falls  $\varphi(x)$  bei  $x_0$  einen Sprung hätte:

$$\varphi(x) = \underbrace{\tilde{\varphi}(x)}_{\text{stetiger Teil}} + \underbrace{A}_{\text{Höhe des Sprungs}} \theta(x - x_0)$$

$\Rightarrow$

$$\varphi'(x) = \tilde{\varphi}'(x) + A \delta(x - x_0)$$

$\Rightarrow$

$$\varphi''(x) = \tilde{\varphi}''(x) + A \delta'(x - x_0)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \int f(x) \delta(x - x_0) dx &= f(x_0) \\ \int f(x) \delta'(x - x_0) dx &= -f'(x_0) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \varphi''(x) &= \tilde{\varphi}''(x) = A \underbrace{\delta'(x - x_0)}_{\text{tritt auf der rechten Seite nicht auf}} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left( \underbrace{V(x)}_{\text{Sprung bei } x_0} - E \right) \left( \underbrace{\tilde{\varphi}(x)}_{\text{stetig}} + A \theta(x - x_0) \right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$A = 0 \Rightarrow \varphi(x) \text{ ist stetig!}$$

Was lässt sich über  $\varphi'(x)$  aussagen?

Dann

$$\begin{aligned} \int_{x_0-d}^{x_0+d} \underbrace{\varphi''(x)}_{\frac{d}{dx} \varphi'(x)} dx &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-d}^{x_0+d} (V(x) - E) dx \\ &= \varphi'(x_0 + d) - \varphi'(x_0 - d) \end{aligned}$$

Endlicher Sprung in  $V(x) \Rightarrow$  endlicher Wert des Integrals

$$\lim_{d \rightarrow 0} (\varphi'(x_0 + d) - \varphi'(x_0 - d)) = 0$$

$\Rightarrow \varphi'(x)$  ist bei  $x_0$  stetig

Falls  $V(x)$  unendlich groß wird, ist keine Aussage möglich.

Bei Potentialen mit endlich großen Sprungstellen sind  $\varphi(x)$  und  $\varphi'(x)$  stetig.

## 4.2 Gebundene Zustände beim Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

(Abb Q21)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x \leq a \\ -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

Betrachte hier nur Lösungen mit  $-V_0 \leq E \leq 0$

### 4.2.1 Lösungen in den Bereichen I, II, III

**Bereich I:**  $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

**Ansatz:**  $\varphi = e^{\pm i k x} \Rightarrow$

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

Da  $E \leq 0 \Rightarrow k$  ist imaginär

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = i \underbrace{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)}}_{:=\kappa} \\ k &= i\kappa \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\varphi^{(I)}(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$$

mit  $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)}$

Da  $e^{-\kappa x}$  für  $x \rightarrow -\infty$  divergiert, ist aus physikalischen Gründen (Normierbarkeit)  $B = 0$  zu wählen

$$\varphi^I(x) = A e^{+\kappa x}$$

**Bereich II:**  $V(x) = -V_0$

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \right) \varphi(x) &= E \varphi(x) \\ -\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) \varphi(x) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= e^{\pm i k x} \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(V_0 + E)}_{\geq 0} \end{aligned}$$

$$\varphi^{\text{II}}(x) = \tilde{C} e^{i k x} + \tilde{D} e^{-i k x}$$

oder

$$\varphi^{\text{II}}(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx)$$

(ist in diesem Fall günstiger, da  $\varphi^{\text{II}}(x)$  reell)

**Bereich III:** Analog zu I

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{III}}(x) &= F e^{\kappa x} + G e^{-\kappa x} \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)} \\ F &= 0, \text{ da } e^{\kappa x} \rightarrow \infty \text{ für } x \rightarrow \infty \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{I}}(x) &= A e^{\kappa x} \\ \varphi^{\text{II}}(x) &= C \cos(kx) + D \sin(kx) \\ \varphi^{\text{III}}(x) &= G e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{I}'}(x) &= \kappa A e^{\kappa x} \\ \varphi^{\text{II}'}(x) &= -k C \sin(kx) + k D \cos(kx) \\ \varphi^{\text{III}'}(x) &= -\kappa G e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Anpassung von  $\varphi(x)$ ,  $\varphi'(x)$  bei  $x = -a$  und  $x = a$

$$1. \quad \varphi^{\text{I}}(-a) = \varphi^{\text{II}}(-a)$$

$$\begin{aligned} A e^{-\kappa a} &= C \cos(-ka) + D \sin(-ka) \\ &= C \cos(ka) - D \sin(ka) \end{aligned} \quad (12)$$

$$2. \quad \varphi^{\text{I}'}(-a) = \varphi^{\text{II}'}(-a)$$

$$\begin{aligned} \kappa A e^{-\kappa a} &= -k C \sin(-ka) + k D \cos(-ka) \\ &= k C \sin(ka) + k D \cos(ka) \end{aligned} \quad (13)$$



$$3. \varphi^{\text{II}}(a) = \varphi^{\text{III}}(a)$$

$$C \cos(ka) + D \sin(ka) = G e^{-\kappa a} \quad (14)$$

$$4. \varphi^{\text{II}'}(a) = \varphi^{\text{III}'}(a)$$

$$-kC \sin(ka) + kD \cos(ka) = -\kappa G e^{-\kappa a} \quad (15)$$

+ Normierung  $\hat{=}$  5 Gleichungen für 4 Unbekannte  $A, C, D, G$

$$(12) + (14)$$

$$(A + G) e^{-\kappa a} = 2C \cos(ka) \quad (16)$$

$$(12) - (14)$$

$$(A - G) e^{-\kappa a} = -2D \sin(ka) \quad (17)$$

$$(13) + (15)$$

$$\kappa(A - G) e^{-\kappa a} = 2Dk \cos(ka) \quad (18)$$

$$(13) - (15)$$

$$\kappa(A + G) e^{-\kappa a} = 2Ck \sin(ka) \quad (19)$$

$$(16), (19)$$

$$\kappa 2C \cos(ka) = 2Ck \sin(ka) \quad (20)$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\kappa}{k} = \tan(ka)$$

$$(17), (18)$$

$$-\kappa 2D \sin(ka) = 2Dk \cos(ka) \quad (21)$$

$$-\frac{\kappa}{k} = \cot(ka)$$

Also: wir erhalten Lösungen des Gleichungssystems

$$1. \text{ wenn } \boxed{\frac{\kappa}{k} = \tan(ka)} \Rightarrow (21) \text{ ist nur erfüllbar für } D = 0 \stackrel{(17)}{\Rightarrow} A = G \stackrel{(16)}{\Rightarrow} 2A \cdot e^{-\kappa a} = 2G \cos(ka)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & -\infty \leq x \leq -a \\ A \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)} & -a \leq x \leq a \\ Ae^{-\kappa x} & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$\hat{=}$  gerade Funktion

$$2. \text{ wenn } \boxed{-\frac{\kappa}{k} = \cot(ka)} \stackrel{(20)}{\Rightarrow} C = 0 \stackrel{(16)}{\Rightarrow} G = -A \stackrel{(18)}{\Rightarrow} 2A\kappa e^{-\kappa a} = 2Dk \cos(ka)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x} & -\infty \leq x \leq -a \\ A \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)} \sin(kx) = -A \frac{e^{-\kappa a}}{\sin(ka)} \sin(kx) & -a \leq x \leq a \\ -Ae^{-\kappa x} & a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$\hat{=}$  ungerade Funktion

### 4.2.2 Auswertung der Lösungsbedingung

$$\begin{aligned}\kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} |E| &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2 \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - \kappa^2\end{aligned}$$

#### Gerade Zustände

$$\begin{aligned}\tan(ka) &= \frac{\kappa}{k} = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2} \cdot a}{k \cdot a} \\ ka \tan(ka) &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - (ka)^2}\end{aligned}$$

$$y := ka, \quad R^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \Rightarrow$$

$$y \tan y = \sqrt{R^2 - y^2} \quad \leftarrow \text{Kreis}$$

(Abb Q22)

Je nach Größe von  $V_0$  (und damit von  $R$ ) gibt es eine oder mehrere Lösungen  $k_n$

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E_n|)$$

$$|E_n| = V_0 - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Energie der Zustände mit gerader Wellenfunktion

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

#### Ungerade Zustände

$$\kappa = -k \cot(ka)$$

$\Rightarrow$

$$-y \cdot \cot(y) = \sqrt{R^2 - y^2}$$

Es gibt nicht für alle Werte von  $V_0$  eine Lösung.

Nur Lösung für

$$V_0 \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

(Abb Q23)

- Zustände mit gerader und ungerader Symmetrie wechseln sich ab
- Abstand zwischen den  $k_n$  ist nahezu konstant  
 $\Rightarrow$  Abstände zwischen den Energien  $E_n$  ist nahezu quadratisch bezüglich  $n$

**Grenzfall**  $V_0 \rightarrow \infty$  Schnittpunkte von  $y \cdot \tan y$  (bzw.  $-y \cdot \cot y$ ) liegen bei  $y_n = n \frac{\pi}{2}$   $n = 1, 2, 3, \dots$

$\Rightarrow$

$$k_n = \frac{y_n}{a} = \frac{\pi}{2a} n \quad (L = 2a \hat{=} \text{Breite des Topfes})$$

Abstände der Energien vom Topfboden:

$$\Delta E_n = E_n + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{L} \cdot n \right)^2$$

Vergleiche mit Kapitel 3.5 auf Seite 19

### 4.2.3 Wellenfunktion im endlich hohen Topf

(Abb Q24)

## 4.3 Harmonischer Oszillator

(Abb Q25)

$$\frac{1}{2}kx^2 = V(x)$$

### Klassisches System

z.B. Federpendel

(Abb Q26)

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow F(x) = -kx$$

Newton:

$$m\dot{x} = F(x) = -kx$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} x(t) &= A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \\ \omega &= \sqrt{\frac{k}{m}} \end{aligned}$$

### Energie

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) + \frac{1}{2}kx^2(t) \\ E &= \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 + B^2) \end{aligned}$$

### Quantenmechanische Systeme

- Schwingungen von Atomen in Molekülen und Festkörpern  
Beispiel: H<sub>2</sub> Molekül (Abb Q27)  
Potential zwischen Atomen:  
(Abb Q28)  
Harmonischer Oszillator ist sehr gute Näherung bei Schwingungen mit kleiner Auslenkung
- Photonen (Lichtquanten) verhalten sich wie quantenmechanische Oszillatoren

#### 4.3.1 Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \end{aligned}$$

Lösung durch

- Potenzreihenansatz
- „algebraische“ Methode (Später)

**1. Schritt: Transformation auf dimensionslose Koordinaten** Idee: Substitution  $y = \alpha \cdot x$  so, dass  $\frac{d^2}{dy^2}$  und  $y^2$  gleiche Vorfaktoren haben

$$\Rightarrow x = \frac{1}{\alpha} y \rightarrow x^2 = \frac{1}{\alpha^2} y^2$$

$$\frac{d}{dx} = \alpha \frac{d}{dy}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \frac{d^2}{dy^2}$$

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \alpha^2 \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} k \frac{1}{\alpha^2} y^2$$

$$\frac{\alpha^2 \hbar^2}{m} = \frac{k}{\alpha^2} \Rightarrow \alpha^4 = \frac{km}{\hbar^2}$$

Abkürzung:  $\omega := \sqrt{\frac{k}{m}} \alpha^4 = \frac{1}{\hbar^2} m^2 \omega^2$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \\ \hat{H}\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \varphi(x) &= \varphi\left(\frac{y}{\alpha}\right) := \phi(y) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \phi(y) = E\phi(y)$$

$\Rightarrow$

$$\left( -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \phi(y) = \lambda \phi(y)$$

$$\lambda = \frac{E \cdot 2}{\hbar\omega}$$

**2. Schritt: Ansatz für  $\phi(y)$**

**Zunächst Analyse für  $y \rightarrow \pm\infty$**  Sei  $|y| \gg |\lambda|$ :

Näherungsweise:  $\left( \frac{d^2}{dy^2} - y^2 \right) \phi(y) = 0$

Ansatz:

$$\begin{aligned} \phi(y) &= e^{-\beta y^2} \\ \phi'(y) &= -\beta 2y e^{-\beta y^2} \\ \phi''(y) &= -\beta 2 e^{-\beta y^2} + \beta^2 4y^2 e^{-\beta y^2} \end{aligned}$$

Mit  $\beta = \frac{1}{2}$  folgt:

$$\phi''(y) = (-1 + y^2) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$y \rightarrow \pm\infty$ :  $(-1)$  kann vernachlässigt werden

$\Rightarrow \phi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$  löst Differentialgleichung für  $y \rightarrow \pm\infty$

$\Rightarrow$  Ansatz für alle  $y$ :

$$\phi(y) = \underbrace{f(y)}_{\text{gesuchte Funktion}} e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\phi'(y) &= f'(y) e^{-\frac{y^2}{2}} + f(y) \left(-\frac{2y}{2}\right) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ \phi''(y) &= (f''(y) - f(y) - yf'(y)) e^{-\frac{y^2}{2}} + \left(-\frac{2y}{2}\right) (f'(y) - yf(y)) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ &= (f''(y) - 2yf'(y) + (y^2 - 1)f(y)) e^{-\frac{y^2}{2}}\end{aligned}$$

Somit wird aus

$$\phi''(y) + (\lambda - y^2)\phi(y) = 0$$

folgende Differentialgleichung für  $f(y)$

$$f''(y) - 2yf'(y) + (\lambda - 1)f(y) = 0$$

Hermiteische Differentialgleichung nach C. Hermite (1822 - 1901)

### Einfache Ansätze

1.  $f(y) = c$  (Konstante)  
 $f'' = f' = 0 \Rightarrow (\lambda - 1)c = 0$   
 $\Rightarrow$  Eigenwert  $\lambda = 1$ ,  $f = \text{const}$
2.  $f(y) = a \cdot y$ ,  $f'(y) = a$ ,  $f''(y) = 0$   
 $0 - 2y \cdot a + (\lambda - 1)ay = 0$   
 $(\lambda - 3)ay = 0$   
 $\Rightarrow$  Eigenwert  $\lambda = 3$ ,  $f(y) = ay$
3.  $f(y) = by^2$  keine Lösung, aber  $f(y) = by^2 + ay + c$  ist Lösung

### 3. Schritt Lösung der Differentialgleichung durch Potenzreihenansatz Idee: Setze

$$f(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j y^j$$

Dazu:

$$\begin{aligned}f'(y) &= \sum_{j=0}^{\infty} A_j j y^{j-1} \\ f''(y) &= \sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}\end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}}_{f''(y)} - \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} 2A_j j y^j}_{2yf'(y)} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} A_j (\lambda - 1) y^j}_{(\lambda-1)f(y)} = 0$$

### Umsummation

$$f''(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j j(j-1) y^{j-2}$$

$$l := j-2 \curvearrowright j = l+2$$

$$f''(y) = \sum_{l=0}^{\infty} A_{l+2} (l+2)(l+1) y^l$$

Nenne  $l = j$

$$f''(y) = \sum_{j=0}^{\infty} A_{j+2} (j+2)(j+1) y^j$$

$$\Rightarrow f''(y) - 2y f'(y) + (\lambda - 1) f(y) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{(A_{j+2} (j+2)(j+1) + (\lambda - 1 - 2j) A_j)}_{\text{Soll für alle } y \text{ gelten!} \Rightarrow \sim = 0} y^j = 0$$

$$\sim = 0 \Rightarrow$$

$$A_{j+2} = -\frac{\lambda - 1 - 2j}{(j+2)(j+1)} A_j \quad (22)$$

Rekursionsformel für die Koeffizienten

Starte z.B. mit  $A_0 \Rightarrow A_2, A_4, A_6, \dots$

oder mit  $A_1 \Rightarrow A_3, A_5, A_7, \dots$

Liefert für alle  $\lambda$  Lösungen

Aber  $\phi(y) = f(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$  muss normierbar bleiben

Wir überzeugen uns davon, dass  $f(y)$  wie  $e^{y^2}$  anwächst, falls die Potenzreihe nicht abbricht.

**Zwischenrechnung** Betrachte „große“ Werte von  $j$

$j \rightarrow \infty$ :

$$A_{j+2} = \frac{2j}{j^2} A_j = \frac{2}{j} A_j$$

$$\curvearrowright \left\| \frac{A_{j+2}}{A_j} = \frac{2}{j} \right\|$$

$$e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (y^2)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} y^{2n}$$

$$j = 2n, n = \frac{j}{2}$$

$$e^{y^2} = \sum_{\substack{j=0 \\ \text{mit } j \text{ gerade}}}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} y^j = \sum_{\substack{j=0 \\ \text{alle } j}}^{\infty} B_j y^j$$
$$B_j = \begin{cases} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} & j \text{ gerade} \\ 0 & j \text{ ungerade} \end{cases}$$

$$B_{j+2} = \frac{1}{\left(\frac{j+2}{2}\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)} = B_j \frac{1}{\left(\frac{j}{2}+1\right)}$$

$$\frac{B_{j+2}}{B_j} = \frac{1}{\frac{j}{2}+1} \underset{j \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\frac{j}{2}} = \frac{2}{j} \left( \text{wie } \frac{A_{j+2}}{A_j} \right)$$

$\Rightarrow$  Potenzreihe verhält sich für große  $y$  wie  $e^{y^2}$  (für ungerade Potenzen Vergleich mit  $ye^{y^2}$ )

$\Rightarrow$  Potenzreihe muss abbrechen!

Abbrechen bedeutet: Ab einem bestimmten Index  $n$  sind alle Koeffizienten mit  $j > n$  gleich null.

Also

$A_0, A_2, A_4, \dots, A_n \neq 0$  und  $A_{n+2}, A_{n+4}, \dots = 0$  ( $n$  gerade)

$A_1, A_3, A_5, \dots, A_n \neq 0$  und  $A_{n+2}, A_{n+4}, \dots = 0$  ( $n$  ungerade)

Dies tritt nach (22) auf für:

$$(\lambda - 1 - 2n) = 0$$

$\Rightarrow$

$$\lambda = 2n + 1 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$\Rightarrow$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda = \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Energieniveaus des harmonischen Oszillators

(Abb Q29)

Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$E_n$ :

- diskret
- äquidistant

**Wellenfunktionen**  $\phi_n(x) = f_n(x) e^{-\frac{y^2}{2}}$

$$A_{j+2}^{(n)} = \frac{(2j+1-\lambda^{(n)})}{(j+2)(j+1)} A_j^{(n)} = \frac{2j-2n}{(j+2)(j+1)} A_j^{(n)}$$

**Gerade Werte von  $n$**   $n = 0: A_0^{(0)} \neq 0 \Rightarrow A_2^{(0)} = 0$

$$\begin{aligned} f_0(y) &= A_0^{(0)} \\ \lambda^{(0)} &= 1 \end{aligned}$$

$n = 2: (\lambda = 5) A_0^{(2)} \neq 0$

$$\begin{aligned} A_2^{(2)} &= \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot 2}{2 \cdot 1} A_0^{(2)} = -2A_0^{(2)} \\ f_2(y) &= A_0^{(2)} (-2y^2 + 1) \end{aligned}$$

$n = 4: A_0^{(4)} \neq 0$

$$\begin{aligned} A_2^{(4)} &= \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot 4}{2} A_0^{(4)} = -4A_0^{(4)} \\ A_4^{(4)} &= \frac{2 \cdot 2 - 2 \cdot 4}{(2+2)(2+1)} A_2^{(4)} = \frac{-4}{4 \cdot 3} A_2^{(4)} = -\frac{1}{3} A_2^{(4)} \\ &= +\frac{4}{3} A_0^{(4)} \end{aligned}$$

$$f_4(y) = A_0^{(4)} \left( 1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4 \right)$$

und so weiter.

**Ungerade Werte von  $n$**

$$\begin{aligned} f_1(y) &= A_1^{(1)} = y \\ f_3(y) &= A_1^{(3)} \left( y - \frac{2}{3}y^3 \right) \\ &\vdots \end{aligned}$$

**Konvention** Wählt man die  $A_0^{(n)}$  bzw.  $A_1^{(n)}$  danach, dass vor der höchsten Potenz von  $y$  ein Faktor  $2^n$  steht, so bezeichnet man die Lösung als Kermite Polynome.

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Da  $\varphi_n(x) = \phi_n(\alpha x)$ ,  $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$  und

$$\phi_n(\alpha x) = H_n(\alpha x) e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} \underbrace{N_n}_{\text{Normierungsfaktor}}$$

folgt

$$\varphi_n(x) = N_n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Eigenzustände des harmonischen Oszillators

mit  $N_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$  (hier ohne Rechnung)



## Resultate

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2,$$

$$\varphi_n(x) = N_n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(Folie „Der harmonische Oszillator“)

- $n$  gerade  $\rightarrow \varphi_n(x) = \varphi_n(-x)$ ,  $n$  ungerade  $\varphi_n(x) = -\varphi_n(-x)$
- $\varphi_n(x)$  besitzt  $n$  Knoten
- Abfall von  $e^{-\frac{m}{2\hbar}\sqrt{\frac{k}{m}}x^2} = e^{-\frac{\sqrt{m}\sqrt{k}}{2\hbar}x^2}$   
Starker Abfall bei:
  - großer Federkonstante  $k$
  - großer Masse

## Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte    Quantenmechanik:

$$\varrho_{qm}(x) = |\psi_n(x, t)|^2 = |\varphi_n(x)|^2$$

da  $\psi_n(x, t) = e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$  stationärer Zustand

Klassisches Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

(Abb Q30)

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \cos(\omega t) \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{N}{|v(x)|} \end{aligned}$$

$N$ : Normierungskonstante  $\rightarrow \int \varrho_{kl}(x) dx = 1$

$v(x)$ : Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= -x_0 \omega \sin(\omega t) \\ |\dot{x}(t)| &= x_0 \omega \sqrt{1 - \cos^2(\omega t)} \\ &= \omega \sqrt{x_0^2 - x_0^2 \cos^2(\omega t)} \\ &= \omega \sqrt{x_0^2 - x^2} \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{N}{\omega \sqrt{x_0^2 - x^2}}, \text{ Es folgt dann } N = \frac{\omega}{\pi} \\ \varrho_{kl}(x) &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x_0^2 - x^2}} \end{aligned}$$

(Abb Q31)

(Folie „Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte“)

**Beispiel** klassischer Oszillator mit  $m = 0,1\text{kg}$ ,  $\omega = 10\text{Hz}$ ,  $x_0 = 1\text{cm}$

$\Rightarrow$

$$E = \frac{1}{2} k x_0^2 = \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}^2}$$

quantenmechanischer Oszillator

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = 1,054 \cdot 10^{-34} \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}} \cdot 10 \cdot \frac{1}{\text{s}} \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

$\Rightarrow$

$$n + \frac{1}{2} = 4,7 \cdot 10^{29}$$

#### 4.3.2 Eigenschaften der Hermite-Polynome

Hermite-Polynome zählen zu „speziellen Funktionen der mathematischen Physik“

Differentialgleichung

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0$$

$$H_n(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^j n!}{j! (n-2j)!} (2x)^{n-2j} \quad (23)$$

$$\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{n-1}{2} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

(folgt aus Rekursionsformel)

**Rodrigues Formel**

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Beweis z.B.

- Berechnung  $H_n'(x)$ ,  $H_n''(x)$
- Einsetzen in Differentialgleichung
- vollständige Induktion:  $n = 0$ , Schluss von  $n$  auf  $n + 1$

**Rekursionsformeln**

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x)$$

folgt durch Ableitung von (23)

$$2xH_n(x) = H_{n+1}(x) + 2nH_{n-1}(x)$$

folgt aus (25) durch  $\frac{d}{dx}$  (24)

$\Rightarrow$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

## Erzeugende Funktionen

$$\begin{aligned}
 F(x, s) &= e^{x^2 - (s-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{s^n}{n!} \\
 &= \underbrace{1}_{H_0} + \underbrace{2x}_{H_1} s + \underbrace{(4x^2 - 2)}_{H_2} \frac{s^2}{2} + \dots
 \end{aligned}$$

Orthogonalität (bezüglich  $e^{-x^2}$ )

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx = \delta_{n,n'}$$

$\Rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_{n'}(x) e^{-x^2} dx = \delta_{n,n'} 2^n n! \sqrt{\pi}$$

### 4.3.3 Zeitliches Verhalten des harmonischen Oszillators

Bisher: stationäre Lösung

$$\psi_n(x, t) = e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x)$$

Jetzt: Überlagerung:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} \varphi_n(x) \quad (26)$$

Beispiel I: Überlagerung von 3 Zuständen

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} \psi_1(x, t) + \frac{1}{2} \psi_2(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_3(x, t)$$

$$\begin{aligned}
 1 &\stackrel{!}{=} \int |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{1}{4} \int |\psi_1(x, t)|^2 dx + \frac{1}{4} \int |\psi_2(x, t)|^2 dx + \frac{1}{2} \int |\psi_3(x, t)|^2 dx \\
 &\quad + \text{Mischterme, deren Integral verschwindet} \\
 &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = 1
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= e^{-\frac{\alpha^2}{2} x^2} \left( \frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \\
 &\quad \cdot \left( \frac{1}{2} \cdot e^{-i\frac{3}{2}\omega t} \cdot \frac{2\alpha x}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \cdot e^{-i\frac{5}{2}\omega t} \frac{4\alpha^2 x^2 - 2}{\sqrt{8}} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{7}{2}\omega t} \frac{8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x}{\sqrt{48}} \right) \\
 \alpha &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}
 \end{aligned}$$

(Folie „Dynamik von Wellenpaketen“ linke Spalte)

$|\psi(x, t)|^2$  oszilliert mit  $\cos(\omega t)$  und  $\cos(2\omega t)$

$\langle \hat{x} \rangle_t$  oszilliert nur mit  $\cos(\omega t)$

**Beispiel II: quasi klassischer Zustand** Dazu: Wellenpaket  $\psi(x, t)$  bei  $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\alpha} \left( \frac{1}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2}$$

(1) Berechnung der  $c_n$  bei  $t = 0$  aus (26)

$$\underbrace{(26)}_{\text{mit } t=0} \int \varphi_n^*(x) dx \Rightarrow \int \varphi_n^* \psi(x, 0) dx = \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\int \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx}_{\delta_{n,n'}}$$

$\Rightarrow$

$$c_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x, 0) dx$$

Die explizite Rechnung liefert (siehe w. Nolting, Quantenmechanik I, Aufgabe 4.4.17)

$$c_n = \frac{e^{-\frac{\alpha^2}{4} x_0^2}}{\sqrt{n! 2^n}}$$

Einsetzen in (26) liefert

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{4\pi}} e^{-\frac{m\omega}{k} \left( x - x_0 - \underbrace{\cos(\omega t)}_{\text{Oszillation mit } \omega} \right)^2}$$

(Folie „Dynamik von Wellenpaketen“ rechte Spalten)

$\rightarrow \varrho(x, t)$  ist formstabil und oszilliert mit Frequenz  $\omega$

$\rightarrow$  quasiklassischer Zustand (Glauber-Zustand) (kohärente Zustände)

$$\langle \hat{x} \rangle_t \sim \cos(\omega t)$$

#### 4.4 Allgemeine Aussagen über das zeitliche Verhalten von Erwartungswerten: die Ehrenfest-Gleichungen

Dann  $\langle \hat{O} \rangle_t = \int \psi^*(x, t) \hat{O} \psi(x, t) dx$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle_t &= \int \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} \hat{O} \psi(x, t) dx \\ &+ \int \psi^*(x, t) \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \psi(x, t) dx \quad \left( \text{falls } \hat{O} \text{ von } t \text{ abhängt} \right) \\ &+ \int \psi^*(x, t) \hat{O} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H} \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \hat{H}^* \psi^* = \hat{H} \psi^* \quad \text{für } \hat{H} \text{ reell} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} \int \left( -\hat{H}^* \psi(x, t) \right) \hat{O} \psi(x, t) dx + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^*(x, t) \hat{O} \hat{H} \psi(x, t) dx + \underbrace{\int \psi^*(x, t) \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \psi(x, t) dx}_{\left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t} \\
\frac{d}{dt} \left\langle \hat{O} \right\rangle_t &= \frac{1}{i\hbar} \int \left( \psi^*(x, t) \hat{H} \hat{O} \psi(x, t) - \psi^*(x, t) \hat{O} \hat{H} \psi(x, t) \right) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^*(x, t) \left[ \hat{H}, \hat{O} \right] \psi(x, t) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t
\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \left\langle \hat{O} \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{H}, \hat{O} \right] \right\rangle_t + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle_t$$

Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

Anwendung

$$1. \hat{O} = \hat{x}, \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{H}, \hat{x} \right] \right\rangle_t \\
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V(\vec{r}) \\
\left[ \hat{H}, \hat{x} \right] &= \underbrace{\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{\substack{\frac{1}{2m} \frac{2\hbar}{i} \hat{p}_x \\ \text{(siehe Übungsaufgabe)}}} + \underbrace{\left[ \frac{\hat{p}_y^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{=0} + \underbrace{\left[ \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \hat{x} \right]}_{=0} + \underbrace{[V(\vec{r}), \hat{x}]}_{=0} \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle_t}{m}
\end{aligned}$$

$$\text{Analog } \frac{d}{dt} \langle \hat{y} \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_y \rangle_t}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{z} \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}_z \rangle_t}{m} \Rightarrow$$

$$m \frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{r}} \rangle_t = \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t$$

Klassische Physik:

$$m \frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \vec{p}(t)$$

$$2. \hat{O} = \hat{p}_x, \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{H}, \hat{p}_x \right] \right\rangle_t$$

Dazu:

$$\begin{aligned}
\left[ \hat{H}, \hat{p}_x \right] &= \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \hat{p}_x \right] = [V(\vec{r}), \hat{p}_x] \\
[V(\vec{r}), \hat{p}_x] f(\vec{r}) &= \left( V(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) \right) f(\vec{r}) \\
&= V(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) \right) f(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} V(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} f(\vec{r}) \\
\Rightarrow [V(\vec{r}), \hat{p}_x] &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} F_x(\vec{r}) \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle_t &= \langle F_x(\vec{r}) \rangle
\end{aligned}$$

$$\text{Kraft: } \vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r})$$

Analog für  $\langle \hat{p}_y \rangle_t$  und  $\langle \hat{p}_z \rangle_t$ .

$\frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t = \langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t$
$\frac{d}{dt} \langle \hat{\vec{r}} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{\vec{p}} \rangle_t$

„Ehrenfest-Gleichungen“

Newton:

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

**Achtung** Im Allgemeinen ist

$$\langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t \neq \vec{F}(\langle \vec{r} \rangle_t)$$

Spezialfälle:

- $\vec{F} = \text{const} \hat{=} V(x) = -\alpha x + c$   
insbesondere  $\vec{F} = 0 \hat{=} V(x) = \text{const}$   
(Siehe Teilchen im Potentialtopf, bis auf Sprungstellen des Topfes)
- $\vec{F} = \beta \vec{r}$   
u.a.  $F_x = \beta x \Rightarrow V(x) = -\frac{1}{2}\beta x^2 + c$   
auch  $F_x = \beta x + j \Rightarrow V(x) = -\frac{1}{2}\beta x^2 - jx + c$   
 $\langle F_x(\vec{r}) \rangle = \beta \langle x \rangle + j = F_x(\langle x \rangle)$

$\Rightarrow$  Beim harmonischen Oszillator verhält sich der Erwartungswert  $\langle \vec{r} \rangle_t$  wie die klassische Bahnkurve  
Also:  $\langle \vec{r} \rangle_t = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$

Auch für räumlich schwach veränderliche Kräfte gilt näherungsweise  $\langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle_t = \vec{F}(\langle \vec{r} \rangle_t)$

## 4.5 Streuzustände beim Potentialtopf

(Abb Q32)

Bereich I:  $V(x) = 0, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$

$\varphi(x) \sim e^{\pm i q x}, q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E} \quad E > 0!$

$\varphi^{\text{I}}(x) = A e^{i q x} + B e^{-i q x}$

Bereich II:  $V(x) = -V_0$

$\varphi^{\text{II}}(x) = C e^{i k x} + D e^{-i k x}, k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)}$

Bereich III:  $V(x) = 0$

$\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{i q x} + G e^{-i q x}, q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$

### Physikalische Überlegung

$$\begin{aligned} e^{i q x} \hat{=} \text{Ortsanteil von } \psi(x, t) &= e^{\frac{E t}{i \hbar}} e^{i q x} \\ &= \underbrace{e^{i \left( q x - \frac{E}{\hbar} t \right)}}_{\text{Konstante Phase:}} \\ &\quad \text{größere Zeit} \Rightarrow \text{„größerer“ Ort} \end{aligned}$$

(Abb Q33)

→ Welle läuft von „links“ nach „rechts“

Bezeichnung:

$e^{iqx}$  ist „Welle“, die von links einläuft

$Be^{-iqx}$ : Welle, die bei  $x = -a$  reflektiert wird

(Abb Q34)

Annahme: Für  $x > a$  tritt keine Reflexion auf  $G \Rightarrow 0$

$B, C, D$  und  $F$  folgen aus Stetigkeit von  $\varphi(x)$  und  $\varphi'(x)$  bei  $x = \pm a$

Zunächst: Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x) = \frac{\hbar}{i2m} \left( \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \right)$$

Für  $\psi(x, t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t} \varphi(x)$

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{i2m} \left( \varphi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) - \underbrace{\varphi(x) \frac{\partial}{\partial t} \varphi^*(x)}_{(\varphi(x) \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x))^*} \right) \\ j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left( \varphi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) \right) \end{aligned}$$

Bereich I:

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left( \left( e^{-iqx} + B e^{iqx} \right) \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (e^{iqx} + B e^{-iqx})}_{iq(e^{iqx} - B e^{-iqx})} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m} q - \frac{\hbar}{m} q |B|^2 \\ &= \underbrace{j_{ein}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{j_{ref}}_{\text{reflektierte Welle}} \\ j_{ein} &= \frac{\hbar}{m} q (= \text{const}) \\ j_{ref} &= \frac{\hbar}{m} q |B|^2 (= \text{const}) \end{aligned}$$

Definition:  $R := \frac{|j_{ref}|}{|j_{ein}|}$  Reflexionskoeffizient

Hier:  $R = \frac{\frac{\hbar}{m} q |B|^2}{\frac{\hbar}{m} q} = |B|^2$

Bereich III:  $\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{iqx}$

$$j_{trans} = \frac{\hbar}{m} q |F|^2$$

$T := \left| \frac{j_{trans}}{j_{ein}} \right|$  Transmissionskoeffizient

Hier:  $T = |F|^2$

## Berechnung von $B, C, D, G$

$$1. \varphi^I(-a) = \varphi^{II}(-a)$$

$$e^{-iqa} + Be^{iqa} = Ce^{-ika} + De^{+ika} \quad (27)$$

$$2. \frac{d}{dx}\varphi^I(-a) = \frac{d}{dx}\varphi^{II}(-a)$$

$$\frac{d}{dx}\varphi^I(x) = iq(e^{iqx} - Be^{-iqx})$$

$$iq(e^{-iqa} - Be^{iqa}) = ik(Ce^{-ika} - De^{+ika}) \quad (28)$$

$$3. \varphi^{II}(a) = \varphi^{III}(a)$$

$$Ce^{ika} + D^{-ika} = Fe^{iqa} \quad (29)$$

$$4. \frac{d}{dx}\varphi^{II}(a) = \frac{d}{dx}\varphi^{III}(a)$$

$$ik(Ce^{ika} - De^{-ika}) = iqFe^{iqa} \quad (30)$$

$$5. (27) + \frac{(28)}{iq}$$

$$2e^{-iqa} = \left(1 + \frac{k}{q}\right) Ce^{-ika} + \left(1 - \frac{k}{q}\right) De^{+ika} \quad (31)$$

$$6. (29) + \frac{(30)}{ik}$$

$$2Ce^{ika} = F\left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{iqa} \quad (32)$$

$$7. (29) - \frac{(30)}{ik}$$

$$2De^{-ika} = F\left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{iqa} \quad (33)$$

(32),(33) in (31) einsetzen und nach  $F$  auflösen

$\Rightarrow$

$$F = e^{-2iqa} \left( \cos(2ka) - i \sin(2ka) \frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^{-1}$$

$$T = |F|^2 = \frac{1}{\cos^2(2ka) + \left( \frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^2 \sin^2(2ka)}$$

$$\cos^2(2ka) = 1 - \sin^2(2ka), (k^2 + q^2)^2 = k^4 + q^4 + 2k^2q^2 \Rightarrow$$

$$T = \frac{1}{1 + \left( \frac{k^2 + q^2}{2qk} \right)^2 \sin^2(2ka)}$$

Analog:

$$B = iF \frac{k^2 - q^2}{2kq} \sin(2ka)$$

$$R = |B|^2 = |F|^2 \left( \frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2ka)$$

$\Rightarrow$

$$R + T = 1$$



## Diskussion von $T$

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{E(E+V_0)} \sin^2 \left( 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \right)}$$

(Abb Q35)

(Abb Q36)

$$L = 2a$$

- Transmission hängt von  $E$  ab!

- $T = 1$  für bestimmte Energien

$$\sin \left( 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \right) = 0$$

$$\Rightarrow 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} = n\pi$$

$$(E + V_0) = \frac{n^2 \pi^2}{(2a)^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2} n^2 \pi^2}_{\text{Energien des unendlich hohen Topfes}}$$

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2nL^2}$$

$E_n \hat{=}$  Energien mit  $T = 1$

$\Rightarrow$  Da  $E_n > 0$

$$\begin{aligned} -V_0 + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2nL^2} &> 0 \\ n^2 &> \frac{V_0 2nL^2}{\hbar^2 \pi^2} \\ &\hat{=} \text{minimaler Wert von } n \end{aligned}$$

$E_n \hat{=}$  Resonanzenergien („Streuressonanzen“ bei diesen Energien  $\hat{=}$  Transmission = 1)

## Zusammenfassung (Abb Q37)

### 4.6 Potentialwall

(Abb Q38)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$0 < E < V_0$$

Bereich I:

$$\varphi^{\text{I}}(x) = e^{iqx} + B e^{-iqx}, \quad q = \sqrt{E \frac{2m}{\hbar^2}}$$

Bereich II:  $V(x) = V_0$

Da  $E < V_0$ :

$$\varphi^{\text{II}}(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Bereich III:

$$\varphi^{\text{III}}(x) = F e^{iqx}$$

$B, C, D, F$  folgen aus Stetigkeitsbedingungen

→ Analoge Rechnung (siehe 4.5 auf Seite 46) mit  $\kappa$  statt  $ik$ , bzw.  $-V_0$  statt  $V_0$

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2 \left( 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \right)}$$

Da  $E < V_0 \Rightarrow \sin$  mit imaginärem Argument

$$\sin(ix) = i \sinh(x)$$

⇒

$$T(E) = \frac{1}{1 - \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sinh^2 \left( 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \right)}$$

$T > 0$  für  $E > 0 \hat{=}$  endliche Transmission (im Gegensatz zur klassischen Physik) „Tunneleffekt“

**Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte** (Abb Q39)

Betrachte Fall  $2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \gg 1$  d.h.  $E \ll V_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a^2}$

$$\sinh(x) = \frac{1}{2} (e^x - e^{-x}) \stackrel{x \gg 1}{\approx} \frac{1}{2} e^x$$

Dann kann auch die „1“ im Nenner von  $T(E)$  vernachlässigt werden

$$T(E) \approx \frac{16 (V_0 - E) \cdot E}{V_0^2} e^{-4a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}}$$

**Tunneleffekt** Sei  $E \ll V_0$

$$T(E) = \frac{16 (V_0 - E) E}{V_0^2} e^{-4a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}}$$

Exponentialer Abfall:

- Breite des Walls
- Wurzel der Masse
- Wurzel  $(V_0 - E)$

**Allgemeine Form einer Barriere** (Abb Q40)

**Näherungsformel** Transmission durch  $j$ -ten Wall

$$T_j = \frac{16 (V_j - E) E}{V_j^2} e^{-2\Delta x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_j - E)}}$$

Näherungsweise

$$T_j \approx e^{-2\Delta x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_j - E)}}$$

Gesamte Transmission

$$\begin{aligned}
T &= T_1 \cdot T_2 \cdot \dots \cdot T_N = \prod_{j=1}^N T_j \\
&= \prod_{j=1}^N e^{-2\Delta x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_j - E)}} \\
&= e^{-2\Delta x \sum_{j=1}^N \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_j - E)}}
\end{aligned}$$

Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  (unendlich feine Unterteilung)

$$T = e^{-2 \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx}$$

mit  $V(x_A) = E$ ,  $V(x_B) = E$

„Gamow-Faktor“

(Abb Q41)

Rechnung wie beim Potentialtopf 4.5 auf Seite 46 mit  $V_0$  statt  $(-V_0)$

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(E-V_0)} \sin^2 \left( 2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \right)}$$

(Abb Q42)

## 4.7 Wellenpakete an Potentialbarrieren

Bisher: uneigentliche Eigenzustände

(Abb Q43)

### Wellenpaket

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \int_0^\infty g(q) \varphi_q(x) e^{\frac{E_q t}{i\hbar}} dq \\
g(q) &\text{ z.B. } e^{-j(q-q_0)^2} \quad \text{Gauß'sches Wellenpaket, zentriert um } q_0
\end{aligned}$$

### Energie

$$E = \langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t) dx$$

$$\hat{H} \psi(x, t) = \int_0^\infty g(q) E_q \varphi_q(x) e^{\frac{E_q t}{i\hbar}} dq$$

$$\begin{aligned}
E &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^\infty g(q') E_{q'} \varphi_{q'}(x) e^{\frac{E_{q'} t}{i\hbar}} dq' \int_0^\infty g(q) E_q \varphi_q(x) e^{\frac{E_q t}{i\hbar}} dq dx
\end{aligned}$$

$$\text{Mit } \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{q'}(x) \varphi_q(x) dx = \delta(q - q')$$

(Normierung der uneigentlichen Eigenfunktion) „auf  $\delta$ -Funktion“

$$\Rightarrow E = \int_0^\infty g(q) g^*(q) E_q dq = \int_0^\infty |g(q)|^2 E_q dq$$

(Folie: „Wellepaket an einem Potentialberg“, Folie: „Welle an einem Potentialtopf“)

## 5 Formalismus der Quantenmechanik

### 5.1 Unschärferelation

(Abb Q44)

Dazu: Operator  $\hat{O}$

Unschärfe (zum Quadrat):

$$(\Delta O)^2 = \left\langle \left( \hat{O} - \langle \hat{O} \rangle \right)^2 \right\rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2$$

Betrachte zwei hermitesche Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \left\langle \left( \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 \right\rangle \\ (\Delta B)^2 &= \left\langle \left( \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \right)^2 \right\rangle \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}{2}$$

Verallgemeinerte Unschärferealtion

z.B.  $\hat{A} = \hat{x}$ ,  $\hat{B} = \hat{p}_x$ ,  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p_x \geq \frac{|i\hbar|}{2} = \frac{\hbar}{2}$$

**Beweis**  $\hat{a} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ ,  $\hat{b} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \Rightarrow \hat{a} = \hat{a}^+$ ,  $\hat{b} = \hat{b}^+$  da  $\hat{A} = \hat{A}^+$ ,  $\hat{B} = \hat{B}^+$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle \hat{a}^2 \rangle \\ &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{a}^2 \psi(\vec{r}, t) d^3r \\ &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{a} \hat{a} \psi(\vec{r}, t) d^3r \\ \text{mit } \hat{a} &= \hat{a}^+ \\ &= \int (\hat{a} \psi(\vec{r}, t))^* \hat{a} \psi(\vec{r}, t) d^3r \\ &= \int |\hat{a} \psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \\ (\Delta B)^2 &= \int |\hat{b} \psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \end{aligned}$$

Betrachte:

$$F(\lambda) = \int \left| (\hat{a} + i\lambda \hat{b}) \psi(\vec{r}, t) \right|^2 d^3r \geq 0$$

$\lambda$ : reell

## Ausmultiplizieren

$$\begin{aligned}
 \int \left( (\hat{a} + i\lambda\hat{b}) \psi \right)^* (\hat{a} + i\hat{b}) \psi d^3r &= \int \left( (\hat{a}\psi)^* - i\lambda (\hat{b}\psi)^* \right) (\hat{a}\psi + i\lambda\hat{b}\psi) d^3r \\
 &= \int \psi^* (\hat{a} - i\lambda\hat{b}) (\hat{a} + i\lambda\hat{b}) \psi d^3r \\
 &= \int \psi^* \left( \hat{a}^2 + \lambda^2 \hat{b}^2 + i\lambda \underbrace{(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a})}_{[\hat{a}, \hat{b}]} \right) \psi d^3r \\
 &= \langle \hat{a}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \hat{b}^2 \rangle + i\lambda \langle [\hat{a}, \hat{b}] \rangle \geq 0
 \end{aligned}$$

Es gilt  $[\hat{a}, \hat{b}] = [\hat{A}, \hat{B}]$ ,  $i[\hat{a}, \hat{b}] =: \hat{c}$  (hermitesch)

Wähle speziell  $\lambda = \lambda_0$  mit  $\left. \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=\lambda_0} = 0$

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda_0} &= 2\lambda_0 \langle \hat{b}^2 \rangle + \underbrace{\langle i[\hat{a}, \hat{b}] \rangle}_{\hat{c}} = 0 \\
 \Rightarrow \lambda_0 &= -\frac{\langle \hat{c} \rangle}{2\langle \hat{b}^2 \rangle}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F(\lambda_0) &= \langle \hat{a}^2 \rangle + \left( \frac{\langle \hat{c} \rangle^2}{4(\langle \hat{b}^2 \rangle)^2} \right) \langle \hat{b}^2 \rangle + \left( -\frac{\langle \hat{c} \rangle}{2\langle \hat{b}^2 \rangle} \right) \langle \hat{c} \rangle \\
 &= \langle \hat{a}^2 \rangle - \frac{1}{4} \frac{\langle \hat{c} \rangle^2}{\langle \hat{b}^2 \rangle} \geq 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{a}^2 \rangle \langle \hat{b}^2 \rangle &\geq \frac{1}{4} \langle \hat{c} \rangle^2 \\
 (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 &\geq \frac{1}{4} \langle \hat{c} \rangle^2 \\
 \Delta A \Delta B &\geq \frac{1}{2} |i[\hat{A}, \hat{B}]| = \frac{1}{2} |[\hat{A}, \hat{B}]|
 \end{aligned}$$

da  $\hat{c} = i[\hat{A}, \hat{B}]$