

# QUANTENCHEMIE ①

$$\boxed{\frac{d}{dt} \psi = \cancel{\hbar} - \frac{i}{\hbar} H \psi}$$

Plancksches  
Wirkungs-  
quantum

$$= \frac{h}{2\pi}$$

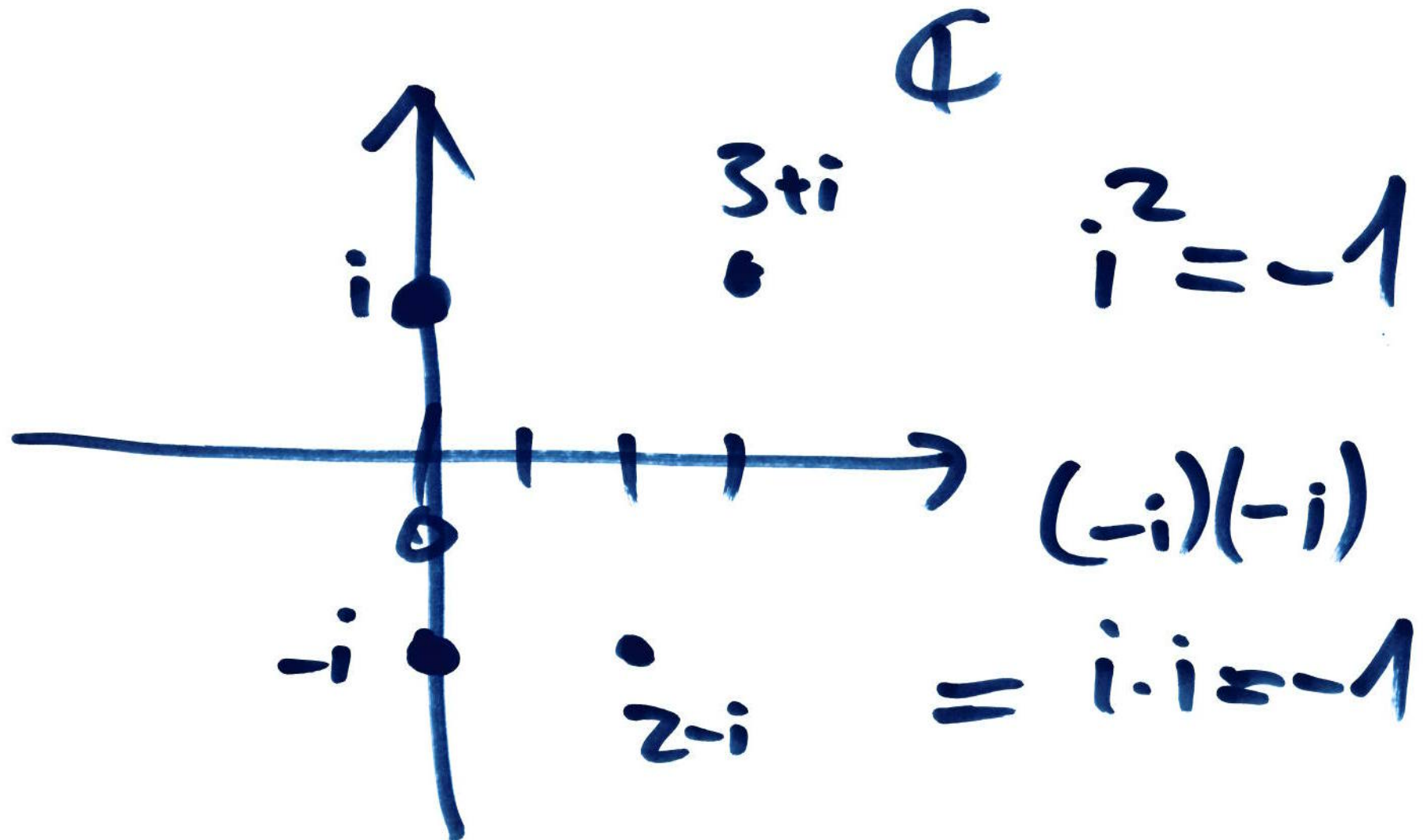
Zeitabh. Schrödingergl.

beschreibt die zeitl. Entw.

von  $\psi$  bis zur nächsten Messung

Änderungsrate  
von  $\psi$  in der Zeit

# C. KOMPLEXE ZAHLEN (2)



$$(3+2i)(4-5i)$$

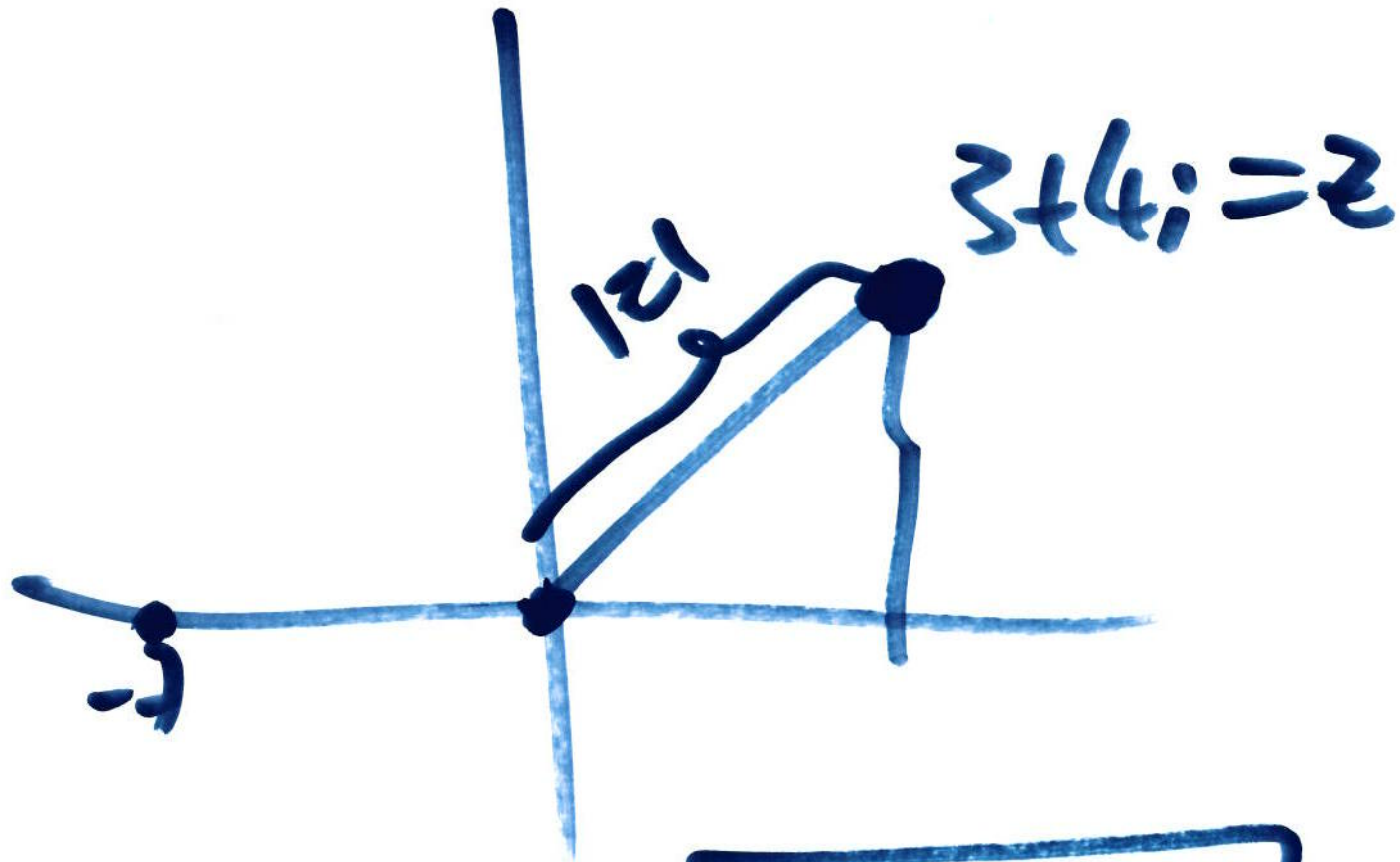
③

$$= 3 \cdot 4 - 3 \cdot 5i + 2i \cdot 4 - 2i \cdot 5i$$

$$= 12 - 15i + 8i + 10$$

$$= 22 - 7i$$

30



$$3+4i=z$$

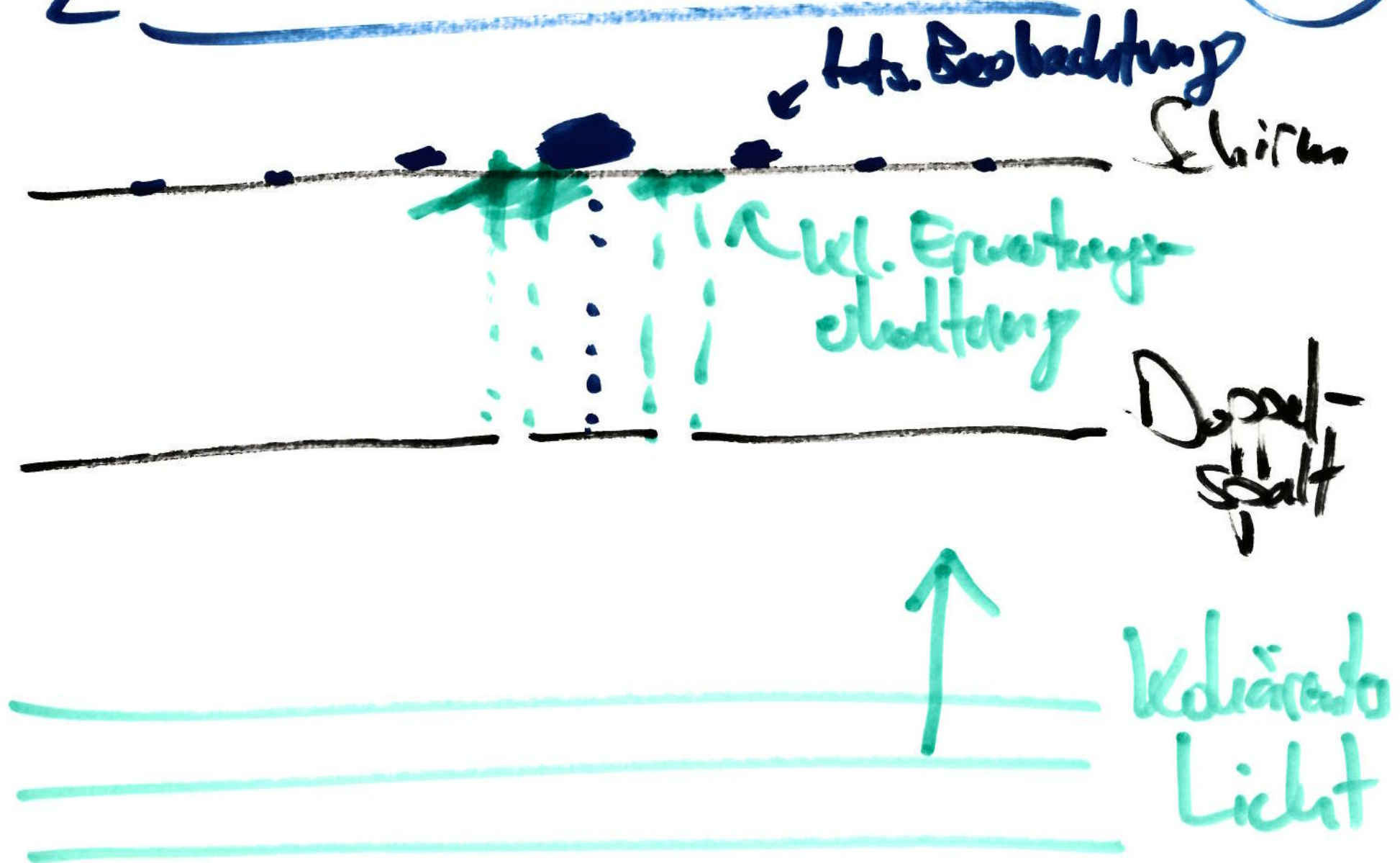
$$\bar{z}=3-4i$$

$$|z| = \sqrt{3^2 + 4^2} = \sqrt{25} = 5$$
$$= \sqrt{z \cdot \bar{z}}$$

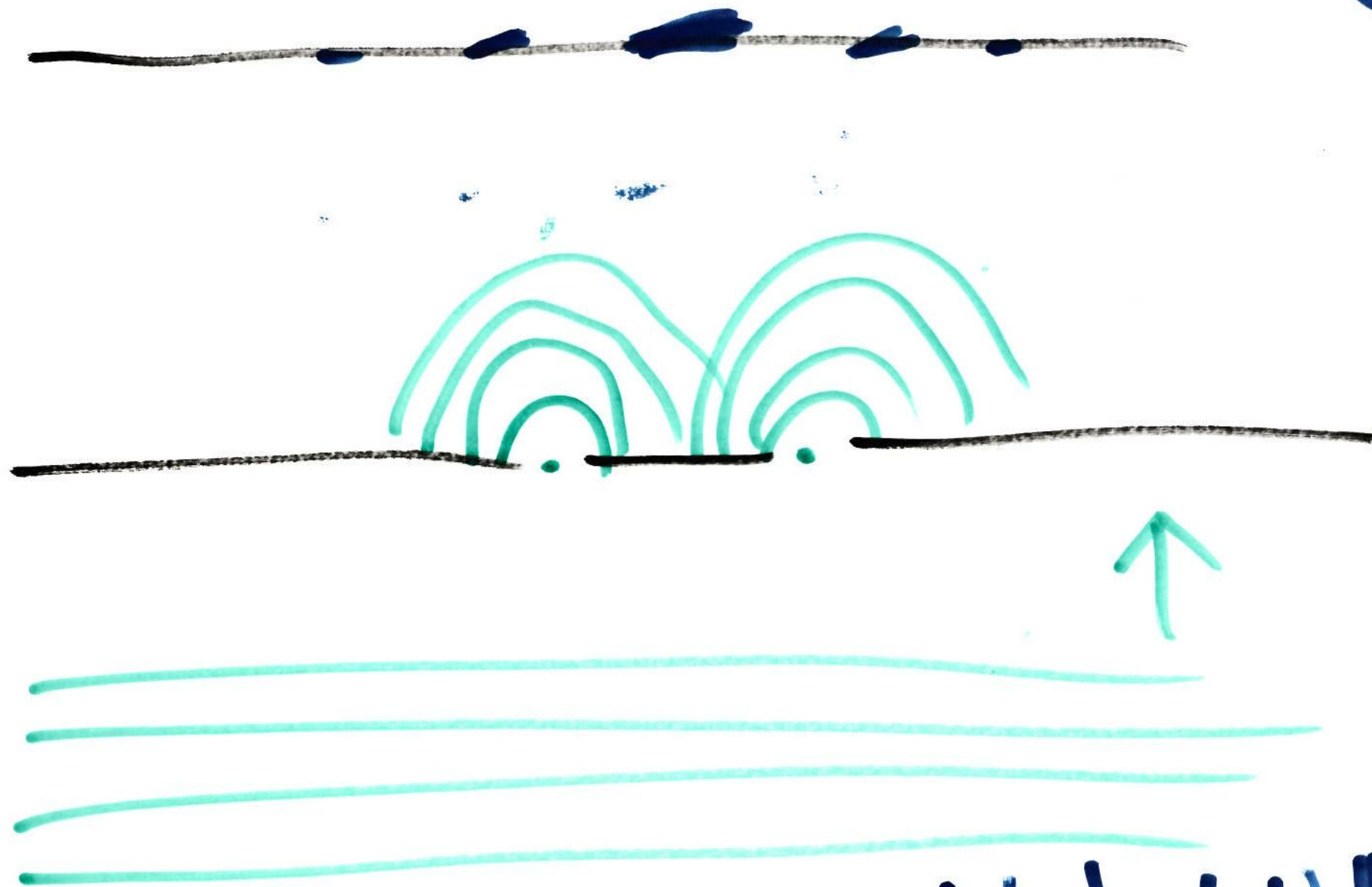


# 1/2. DAS DOPPELSPALT EXP.

3a



3b



Vorst. als Welle

Mit der Vorst. von Licht als ③  
Welle ist das Interferenzmuster  
erklärbar, aber diese Vorst.  
scheint bei sehr intensiven Licht  
(alle paar Sek. ein Photon) nicht zu gelten,  
und mit der Vorst. als Teilchen gibt's keine  
Erklärung.



# 1. WELLENFUNKTION (4)

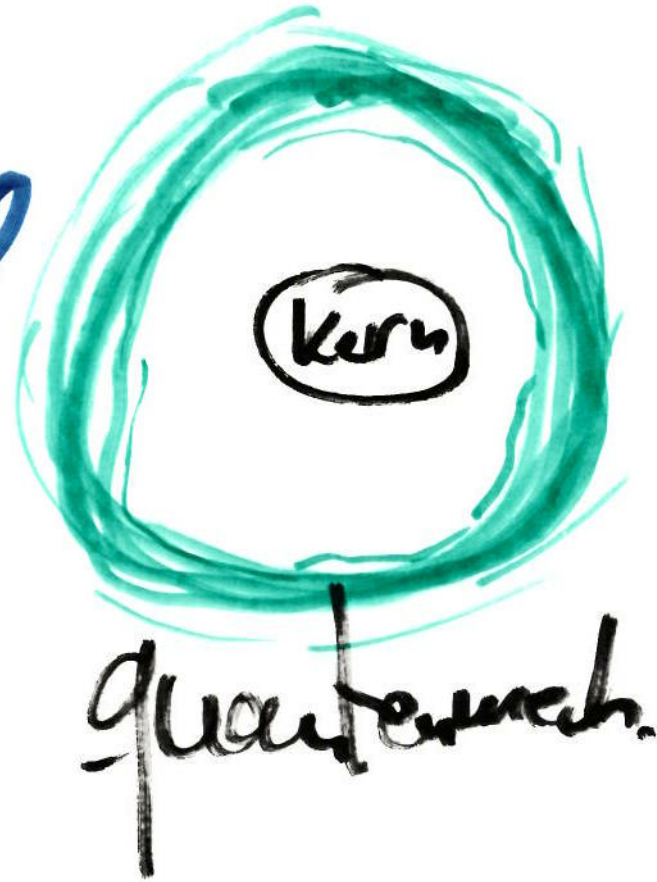
Elektron



Kern

keine  
Belastung

Elektron-  
vium



Quantenmechan.

Bdr

permanente Bewegung

→ Abstrahlung → Sturz in den Kern



5  
 $\psi(x, y, z, t)$  ist eine komplexe Zahl.

$|\psi(x, y, z, t)|^2$  ist die Dichte  
des Elektronenstroms an der Stelle  $(x, y, z)$   
zu Zeit  $t$

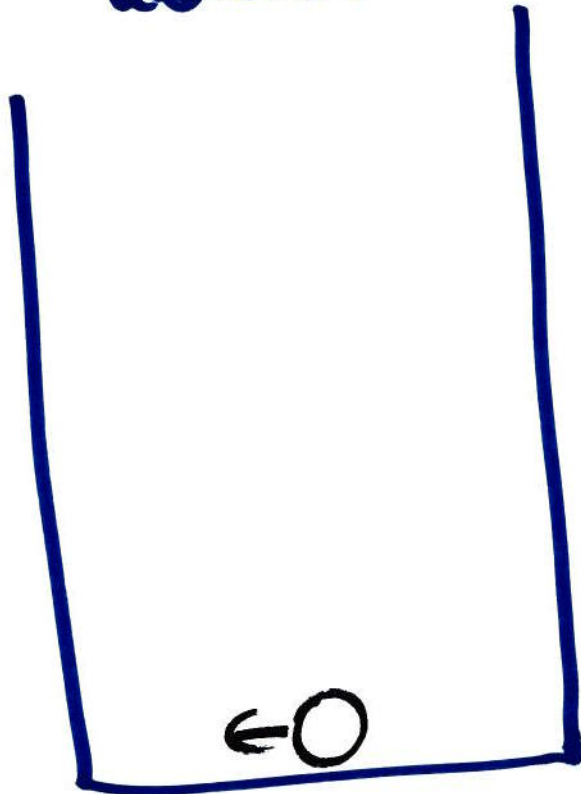
⑥

$|\psi(x, y, z, t)|^2$  ist die  
Wsh., dass sich das  
Elektron zu Zeit  $t$  an  
der Stelle  $(x|y|z)$  manifestiert.

# 2. TEILCHEN IM KASTEN

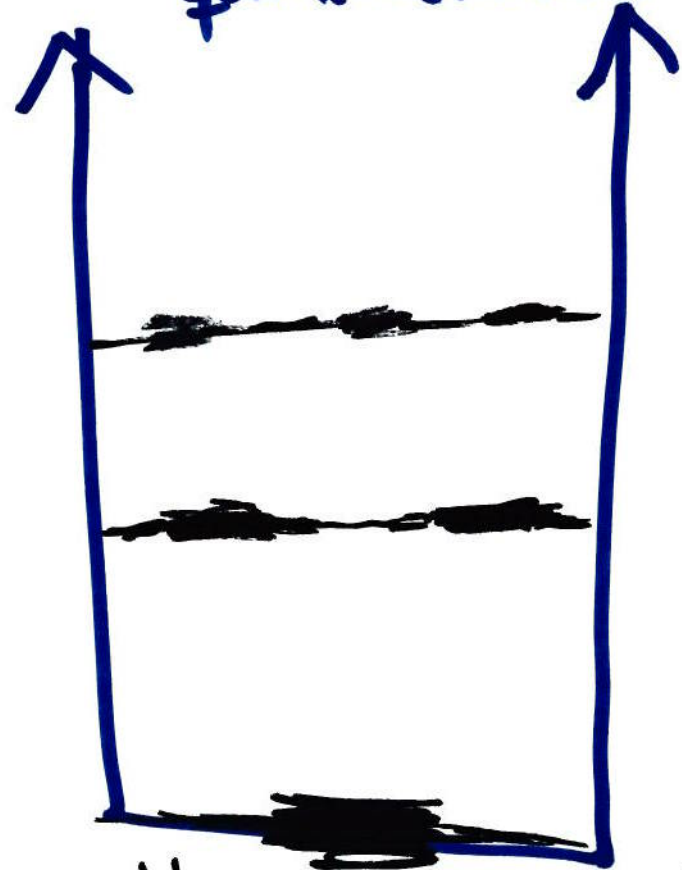
⑦

klassisch



Jede beliebige  
Kornergabe ist  
als Geschwindigkeit  
möglich. / Energie

quantenmechanisch

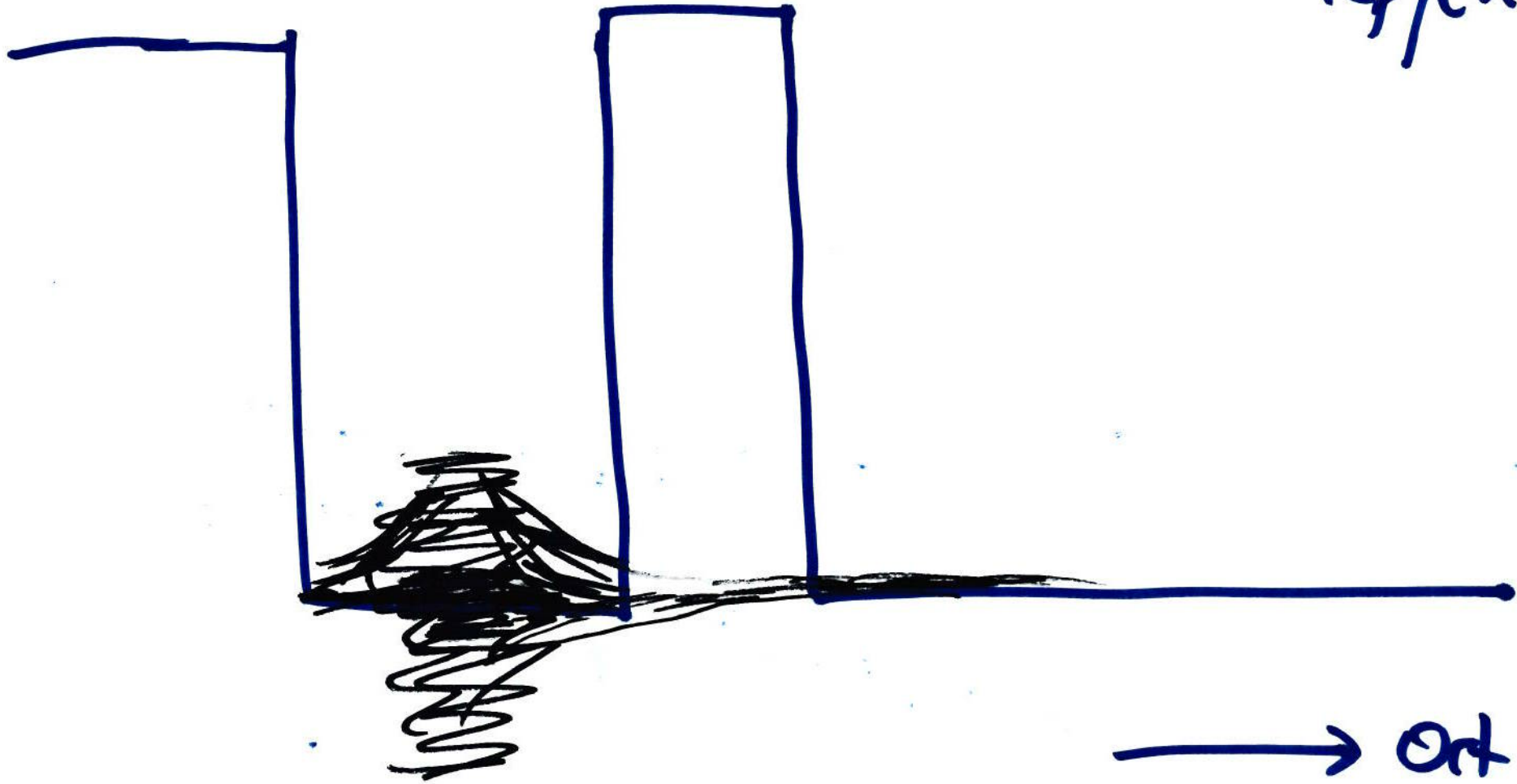


Nur ganz bestimmte  
diskrete Möglichkeiten  
für die Energie existieren.



⑧

Tunneleffekt



# 3. MESSUNG

• s. auch: Harry Potter and the Methods of Rationality (9)

- Kopenhagen-Interpretation
  - Viele-Welten-Interpretation
- } haben das Konzept "Kollaps der Wellenfkt."

## • Quantenmechanik

- weh dazu auf:
- engl. Wikipedia
  - Blog lesswrong.com

- Auch mal ansehen:
- Bohrsche Mechanik
  - Relativistische Quantenmechanik

kommt eine das Kollapskonzept aus

# 4. ZEITUNABH. POTENTIALE

(10)

Ansatz für diesen Fall:

$$\psi(x, \cancel{y}, \cancel{z}, t) = \underbrace{\varphi(x)}_{\text{hängt nur von Ort } x \text{ ab}} \cdot \underbrace{e^{-itE/\hbar}}_{\text{hängt nur von der Zeit } t \text{ ab}}$$

Nach: ist:

$$\underbrace{H}_{\text{"Hamilton-Operator"}} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \underbrace{\psi''(x)}_{\text{Ableitung nach } x} + \underbrace{V(x, \cancel{t})}_{\text{Wert des Potentials an Ort } x \text{ zur Zeit } t} \psi(x, t)$$



Einsetzen des Ansatzes in die Zeitabh. Schröd.-gl.: (11)

$$\psi(x) \cdot \cancel{e^{-itE/\hbar}} \cdot (iE/\hbar)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \cancel{e^{-itE/\hbar}} \psi''(x) + V(x) \cancel{e^{-itE/\hbar}} \psi(x) \right)$$

$$\Rightarrow \psi(x) \cdot (iE/\hbar) = \hbar \frac{i}{2m} \psi''(x) - \frac{i}{\hbar} V(x) \psi(x)$$

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

$$\Rightarrow \boxed{E \cdot \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x)} \quad (12)$$

↑  
"Eigenwert-  
problem"

zeitunabh.  
Schrödingergl.

# 5. LÖSUNG DER SCHRÖDINGERGL. (12)

geht mit dem Variationsprinzip:

Die Lösung  $\psi$  der zeitunabh. Schrödingergl.  
ist die <sup>(glob.)</sup>Minimale von folg. Funktion:

$$J(\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} H \psi(x) dx$$

↑  
ist ein  
"Functional"

Das zugeh.  $E$   
ist dann  $J(\psi)$ .

~~$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi(x) dx$$~~

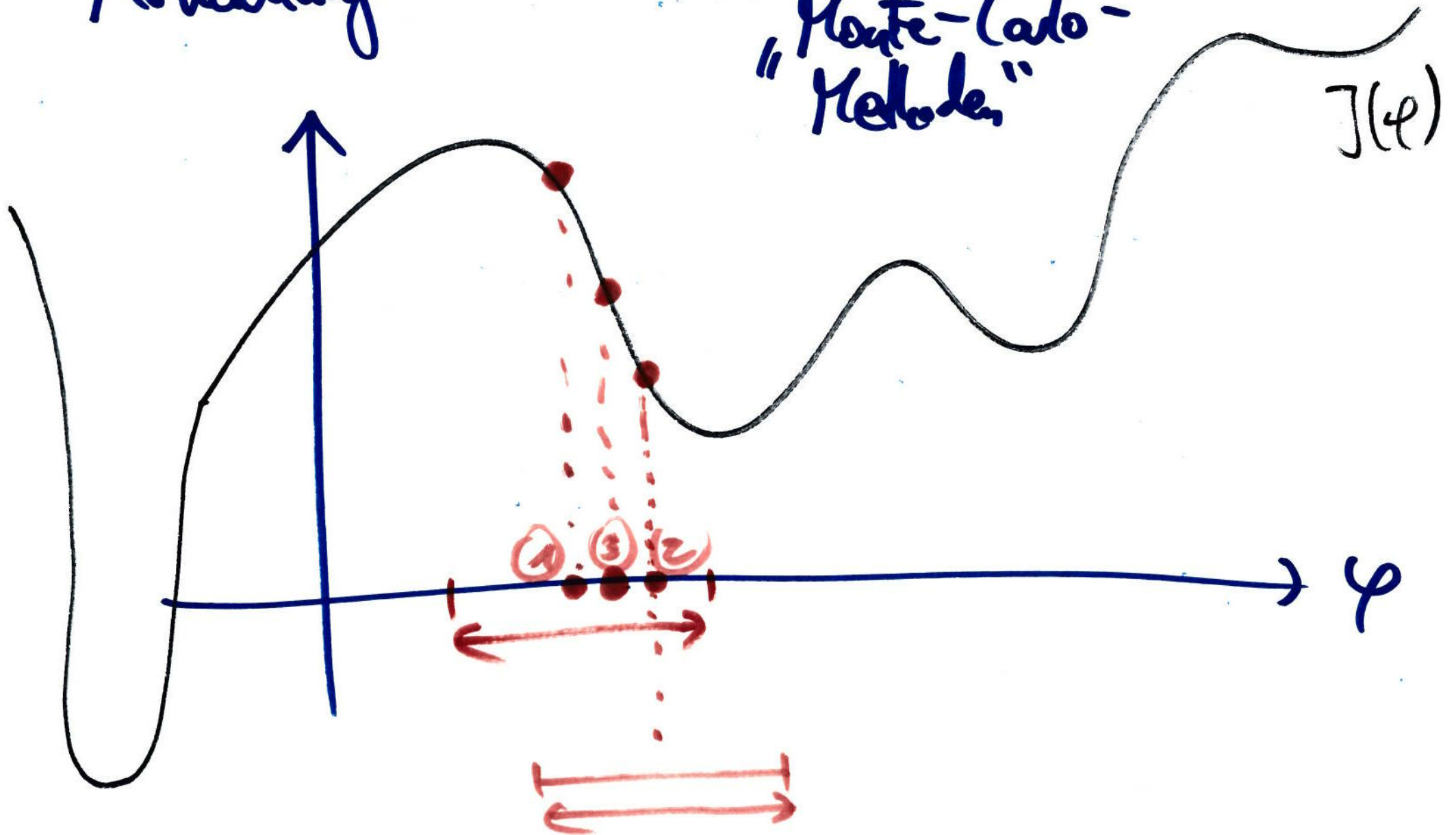


# Numerische Minimierung mit Simultester

(14)

Abbildung:

"Monte-Carlo-  
Methoden"



## 6. HELM HELIUM ATOM

(15)

सूचित वार्ता:

Schrödinger equation variational Method Helium

Beste Kurzgeschichten der Zeiten:



Story of your life

Ted Chiang.

(Basis vom Film Arrival)

- ① freier Wille
- ② Vorherbestimmung
- ③ Prinzip der kleinsten Wirkung