# Mitschrift der Vorlesung "Theoretische Physik 3: Quantenmechanik" im SS14 an der FAU-Erlangen

Benjamin Lotter

# Contents

# Chapter 1

# Einführung

## 1.1 Wiederholung klassische Mechanik

Massepunkt in $1D$: $x(t)$
$m \cdot x(t) = F = -\frac{dU}{dx}$ Impuls $p(t) = m\dot{x}(t)$
$x(0), p(0)$ bekannt $\longrightarrow x(t), p(t)$ bestimmt für alle $t > 0$.
Klassische Mechanik: kausal, deterministisch
Quantenmechanik: kausal, nicht deterministisch **Lagrange-Formalismus**

$$L = T - v = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 - V(x)$$

Euler-Lagrange-Gleichung:

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \\
&\frac{d}{dt} m\dot{x} - \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \Rightarrow mx = -\frac{\partial V}{\partial x}
\end{aligned}$$

**Hamilton-Formalismus**

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

Hamilton-Funktion:

$$\begin{aligned}
H(x,p) &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} - L = p\frac{p}{m} - \left[ \underbrace{\frac{1}{2} m\dot{x}^2}_{\frac{p^2}{2m}} - V(x) \right] \\
&= \frac{1}{2m} p^2 + V(x) = T + V = E_{tot}
\end{aligned}$$

Bewegungsgleichung:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$
$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

## 1.2 Grenzen der klassischen Physik - Quantenphänomene

**Eigenschaften elektromagnetischer Strahlung**

1. Hohlraumstrahlung Frequenzverteilung nicht klassisch erklärbar
2. Photoeffekt

Erklärung: Planck(1900), Einstein (1905)
Lichtquanten (Photone) mit Energie $E = h\nu$ ($h = 6.626 \cdot 10^{-34} Js$ plancksches Wirkungsquantum).

**Eigenschaften von Materie**

1. direkte Linien in der Spektroskopie Atommodelle: Rutherford, Bohr
2. Bewegung von Teilchen zeight Welleneigenschaften Postulat de Broglie (1923) Materieteilchen lassen sich wie Wellen beschreiben $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

**Beispiele:**

1. Ball ($m = 1kg$) mit Geschwindigkeit $v = 10\frac{m}{s}$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} Js}{10kg\frac{m}{s}} = 6.6 \cdot 10^{-35} m$$

2. Elektron mit Energie $100eV (\simeq 1.6 \cdot 10^{-17} J)$

$$\lambda = 1.2 \cdot 10^{-10} m = 1.2\text{Å}$$

Experimente: Davison / Germer (1927): Beugung von Elektronen an Kristallen.

# Chapter 2

# Grundprinzipien der Quantenmechanik und erste Anwendungen

## 2.1 Wellenfunktion, Schrödingergleichung und die Postulate der Quantenmechanik

### 2.1.1 1. Postulat (Wellenfunktion, Zustand)

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch eine Wellenfunktion (Zustandsfunktion/Zustand) $\Psi$ beschrieben, die i.A von den Koordinaten aller Teilchen un der Zeit abhängt.

Z.B ein Teilchen $\vec{r} = (x, y, z) \quad \Psi(x, y, z, t) = \Psi(\vec{x}, t)$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen (zur Zeit $t$) im Bereich $V \in \mathbb{R}^3$ zu finden ist gegeben durch

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

Für infinitesimale Volumen $dV$ ist $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ die Wahrscheinlichkeit das Teilchen in $dV$ um $\vec{r}$ zu finden.

$\varphi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte.

Es gilt die Normierungsbedingung

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

falls $\Psi$ quadratintegrabel. **Bemerkungen:**

1. Systeme mit $n$ Teilchen $\vec{r}_j = (x_j), y_j, z_j) \quad j = 1 \ldots n \to \Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n, t)$

   $H_2$ Molekül (2 Elektronen, 2 Protonen): $\Psi(r_1, r_2, r_3, r_4, t)$

2. i.A $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$
3. $\Psi$ ist bist auf globalen Phasenfaktor eindeutig

$$\tilde{\Psi}(\vec{r}, t) = e^{ia}\Psi(\vec{r}, t)$$
$$\tilde{\varphi} = |\tilde{\Psi}|^2 = |\Psi|^2 = \varphi$$

4. Mathe: $\Psi \in W$, $W$ Vektorraum (Hilbertraum)

   Es gilt Superpositionsprinzip: $\Psi_1, \Psi_2 \in W$ mögliche Systemzustände, dann auch $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \in W$, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$.

   Betrachte Teilchen mit Masse $m$, Geschwindigkeit $v$:

   Mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}, \lambda = \frac{h}{mv}, k = \frac{mv}{\frac{h}{2\pi}}$ folgt

$$e^{ikz} = e^{\frac{i}{\hbar}mvz}$$

   Rechts:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \Psi_1(x) + \Psi_2(x) \\ \Psi_{1/2}(x) &= ne^{\frac{imv}{2\hbar L}\left(x \pm \frac{d}{2}\right)^2} \\ &= ne^{\frac{imv}{2\hbar L}\left(x^2 + \frac{d}{r}\right)} \; e^{\pm \frac{imvxd}{2\hbar L}} \end{aligned}$$

   Intensität am Schirm $\sim \varphi(x)$:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= |\Psi(x)|^2 = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \\ &= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 \; + 2\,\mathrm{Re}\left(\Psi_1(x)\Psi_2^*(x)\right) \\ &= |n|^2\left(1 + 1 + 2\,\mathrm{Re}\left(e^{-2i\;\frac{mvxd}{2\hbar L}}\right)\right) \\ &= 2|m|^2\left(1 + \cos\left(\frac{mvd}{\hbar L}x\right)\right) \end{aligned}$$

5. quantenmechanische Wahrscheinlichtkeitsbeschreibung

$$\varphi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

   Aussage über eine Vielzahl von Messungen an identischen Systemen.

   $\longrightarrow$ Indeterminisms

Messbare Größen in der klassischen Mechanik: Funktion auf dem Phasenraum:

**Funktion** $A(x, p)$

**Energie** $E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \to E = H(x, p)$

**Drehimpuls** $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

### 2.1.2 2. Postulat

Jeder messbaren Gröse (Observable) $A$ ist ein (linear, hermetischer) Operator $\hat{A}$ zugeordnet. Man erhält $\hat{A}$ indem man im klassischen Ausdruck $A(x,p)$ dier Ersetzung durchführt.

$$\underbrace{p_z \to \hat{p_x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{Impulsoperator} \qquad \underbrace{x \to \hat{x} \coloneqq x}_{Ortsoperator}$$

Analog $3D$

$$p_z \to \hat{p_y} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \qquad y \to \hat{y} \coloneqq y$$
$$p_z \to \hat{p_z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad z \to \hat{z} \coloneqq z$$

**Bemerkungen:**

1. hermetische Operatoren: Mathe lineare Abbildungen $l\colon W \to W$.

   Notation in der Quantenmechanik :

$$\text{Å}\colon W \to W$$
$$\text{Å}\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t)$$

   **Beispiele:**

   (a) Ortsoperator

$$\hat{x}\Psi(x,y,z) = x\Psi(x,y,z)$$
$$\hat{y}\Psi(x,y,z) = y\Psi(x,y,z)$$

   (b) Impulsoperator

$$\hat{p_x}\Psi(x,y,z) = \frac{\hbar}{-i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z) \qquad \text{(Differentialoperator)}$$

   (c) kinetische Energie:

$$\text{Klassisch: } T = \frac{p^2}{2m}$$
$$\text{Quantenmechanik : } \hat{T} = T(\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{2m}\hat{p_x}^2 = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{i^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$
$$\hat{T}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi$$

$$
\begin{aligned}
3D\colon\ T &= \frac{1}{2m}\left(p_x^2, + p_y^2 + p_z^2\right) \\
\hat{T} &= \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta
\end{aligned}
$$

(d) Energie: Hamiltonoperator

$$
\begin{aligned}
\text{klassisch: Hamiltonfunktion: } H(r,p) &= \frac{p^2}{m} + V(x) \\
\text{Quantenmechanik : } \hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p_1}) &= \frac{1}{2m}\hat{p_x}^2 + V(\hat{x}) \\
&= -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \\
\hat{H}\Psi(x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) \\
3D\colon\ \frac{1}{2m}\left(\hat{p_x}^2 + \hat{p_y}^2 + \hat{p_z}^2\right) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z)
\end{aligned}
$$

### 2.1.3 3. Postulat (Mittelwert, Erwartungswert)

Der Mittelwert (Erwartungswert) einer physikalischen Observablen $A$ für ein System im Zustand $\Psi$ ist

$$
\left\langle \hat{A} \right\rangle (t) = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}, t)\hat{A}\Psi(\vec{r}, t)
$$

**Bemerkungen:**

1. Beispiel: $\Psi(x) = \frac{1}{\sigma^2\pi}^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma}}$

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

   **Mitterlwert der Ortsmessung:**

$$
\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \underbrace{\hat{x}\Psi(x)}_{x\Psi(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \overbrace{|\Psi(x)|^2}^{\varphi(x)} x
$$

$$
\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{x}_{x = x - x_0} \frac{1}{(\sigma\pi)}^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}} = x_0
$$

**Mittelwert bei Impulsmessung**

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x)\hat{p}(x)\Psi(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)
\end{aligned}
$$

und mit

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{\frac{1}{4}}}\left(-\frac{(x-x_0)}{\sigma^2}\right)e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

folgt

$$\langle\hat{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{(\sigma^2\pi)^{\frac{1}{2}}}\left(-\frac{1}{\sigma^2}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dx\,(x-x_0)\,e^{\frac{-(x-x_0)^2}{\sigma^2}} = 0$$

2. $\left\langle \hat{A} \right\rangle \in \mathbb{R} \rightarrow$ Operator $\hat{A}$ hermitisch.

### 2.1.4 4. Postulat (Messwert, Wahrscheinlichkeit)

Jede einzelne Messung der Observablen $A$ kann nur einen der Eigenwerte $a_n$ des Operators $\hat{A}$ liefern, definiert durch

$$\hat{A}\varphi_n(\vec{r}) = a_n\varphi_n(\vec{r}) \qquad \text{(Eigenwertgleichung)}$$

$\varphi_n$ Eigenfunktion von $\hat{A}$ zum Eigenwert $a_n$.

Die Wahrscheinlichkeit $W_n$ bei einer Messung der Observablen $A$ an einem System im Zustand $\Psi$ den Eigenwert $a_n$ zu finden, ist gegeben durch

$$W_n = |\int d^3r\varphi_n^*(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)|^2$$

Nach der Messung ist das System in dem Eigenzustand $\varphi_n$, der dem gemessenem Eigenwert entspricht. **Bemerkungen:**

1. Annahme $\varphi_n$ normiert $\left(\int d^3r|\varphi_n(\vec{r})|^2 = 1\right)$
2. In vielen Fällen: Eigenwert $a_n$ diskret $\rightarrow$ Messgröße $A$ quantisiert

   Beispiel: mögliche Energien des $H$-Atoms

   $$E_n = -\frac{R}{n^2} \qquad R \approx 13.6eV, n \in \mathbb{R}$$

3. Reduktion der Wellenfunktion Quantenmechanik : System wird i.A durch Messung verändert

   $$\Psi \xrightarrow[\text{Messung von } A \text{ mit Ergebnis } a_n]{} \varphi_n$$

   $\rightarrow$ sofortige weitere Messung von $A$ liefert wieder $a_n$.

   Zustand des Systems nach Messung $\varphi_n$:

   $$W_n = |\int d^3r\varphi_n^*(\vec{r})\Psi(\vec{r})|^2 = |\underbrace{\int d^3r\varphi_n^*(\vec{r})\varphi_n(\vec{r})}_{\int d^3r|\varphi_n(\vec{r})|^2=1}|^2 = 1$$

4. $|\Psi(x)|^2$ Wahrscheinlichkeitsdichte für Messung des Ortes $x$.

   **Verallgemeinerte Eigenfunktion des Operators:**

$$\begin{aligned} \hat{x}\varphi(x) &= \xi\varphi(x) \\ x\varphi(x) &= \xi\varphi(x) \qquad (x-\xi)\, f(x) = 0 \quad \forall x \\ \varphi_\xi(x) &= \delta\,(x-\xi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_\xi &= |\int dx \varphi_\xi^*(x)\Psi(x)|^2 \\ &= |\int dx \delta\,(x-\xi)\,\Psi(x)|^2 = |\Psi(\xi)|^2 \end{aligned}$$

5. Postulate 3 und 4 sind nicht unabhängig ($P4 \to P3$)

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}\rangle &= \int dx \varphi(x) x = \int dx |\Psi(x)|^2 \\ &= \int dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = \int dx \Psi^*(x)\hat{x}\Psi(x) \\ &= \langle\hat{x}\rangle \end{aligned}$$

### 2.1.5 5. Postulat (Schrödingergleichung)

Die Zeitentwicklung der Zustände in der Quantenmechanik wird durch die (zeitabhängige) Schrödingergleichung bestimmt

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

Dabei ist $\hat{H}$ der Hamiltonoperator des Systems **Bemerkungen:**

1. hier: nichtrelativisitsche Quantenmechanik ($v << c$)

2. 

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

   Partielle DGL:

$$\Psi(x,t_0) \xrightarrow[Lss]{ber???} \Psi(x,t)$$

3. Plausibilität der Schrödinger Gleichung Exp: Materie hat Welleneigenschaften $\to$ Wellengleichung

   Elektrodynamik:

$$\text{ebene Welle:} \qquad \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$
$$\text{Dispersionsrelation} \qquad \omega = kc$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = -\omega^2\Psi = -c^2k^2\Psi - c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi$$

Wellengleichung in Quantenmechanik ?

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega)}$$
$$\text{de Broglie:} \qquad \lambda = \frac{k}{p} \to k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\frac{k}{2\pi}} = \frac{p}{\hbar}$$
$$\to p = \hbar k$$

$E = \hbar\omega$ freies Teilchen $E = \frac{p}{2m}$

$$\Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{2m}\frac{p^2}{\hbar} = \boxed{\frac{tk^2}{2m} = \omega(k)}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\Psi = -k^2\Psi = \frac{2m\omega}{\hbar}\Psi = -\frac{2m}{\hbar}\frac{1}{-i}\frac{d}{dt}\Psi$$
$$\Rightarrow i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \underbrace{\hat{H}\Psi}_{\hat{H}=T}$$

## 2.2 Impulsoperator, Impulseigenfunktion, Impulsraumdarstellung

$$\hat{p_x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial}$$
$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

### 2.2.1 Konsistenz der Definition

klassiche Mechanik $p = mv = m\frac{dv}{dt}$ Betrachte Bewegungsgleichung für Mittelwert

$$\frac{d}{d}\langle\hat{x}\rangle(t) = \frac{d}{d}$$

### 2.2.2 Wahrscheinlichkeitsstromdichte mit Kontinuitätsgleichung

$$\varphi = |\Psi(r,t)|^2$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(r,t) = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \nabla\Psi$$
$$-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + \nabla\Psi^*$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\varphi &= \frac{1}{-i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + \nabla\Psi^*\right]\Psi + \Psi^*\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \nabla\Psi\right] \\ &= \frac{\hbar}{2m}\left[(\Delta\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\Delta\Psi)\right] \\ &= \frac{\hbar}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left[\left(\vec{\nabla}\Psi^*\right)\Psi - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right]\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\underbrace{\frac{\hbar}{2m}\left[\Psi^*(\vec{\nabla}\Psi) - \Psi(\vec{\nabla}\Psi^*)\right]}_{\vec{j}(\vec{r},t)\quad \text{Wahrscheinlichkeitsstrom}} = 0$$
$$\frac{d}{dt}\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t) = 0$$

Betrachte Bewegungsgleichung für Mittelwert:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle(t) &= \frac{d}{dt}\int dx\Psi^*(x,t)\hat{x}\Psi(x,t) = \frac{d}{dt}\int dx\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t) \\ &= \int dx\left(\underbrace{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}}_{\frac{1}{(-i\hbar)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x^2}+\nabla\Psi^*\right)}x\Psi + \Psi^*x\underbrace{\frac{\partial\Psi}{\partial t}}_{\frac{1}{(i\hbar)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\nabla\Psi\right)}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2im}\int dx\left(\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi - \Psi^*x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)\end{aligned}$$

---

**NR:**

$$\int dx\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi \underset{PI}{=} \int dx\Psi^*\underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi)}_{\frac{\partial}{\partial x}\left(-\Psi+x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)=2\frac{\partial\Psi}{\partial x}+x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}}$$

Randerterme verschwinden: $\Psi(x) \underset{x\pm\infty}{\to} 0$.

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2im}\int dx \left(2\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^* x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi^* x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)\\
&= \frac{1}{m}\int dx \Psi^*(x,t)\underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{=\hat{p}_x}\Psi(x,t)\\
&= \frac{1}{m}\int dx \Psi^*\hat{p}_x\Psi\\
&= \frac{1}{m}\langle\hat{p}_x\rangle(t) = \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle(t) \to \text{genau wie klassische Mechanik}
\end{aligned}
$$

### 2.2.3 Impulsoperator: Generator für Translation

$$
\begin{aligned}
e^{a\frac{\partial}{\partial x}}\Psi(x) &= \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\Psi \quad a\in\mathbb{R}}_{\text{Taylorentwicklung}}\\
&= \Psi(x+a)
\end{aligned}
$$

Impulsoperator $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$:

$$
e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}\Psi(x) = e^{a\frac{\partial}{\partial x}}\Psi(x) = \Psi(x+a)
$$

### 2.2.4 Impulseigenschaften

$$
\begin{aligned}
\hat{p}\varphi(x) &= p'\varphi(x) \quad a\in\mathbb{R}\\
\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\varphi(x) &= p'\varphi(x)
\end{aligned}
$$

$$
\to \boxed{\varphi_{p'}(x) = ce^{\frac{i}{\hbar}p'x}} \quad p'\in\mathbb{R} \qquad \text{(verallgemeinerte Eigenfunktion)}
$$

$\varphi_{p'}(x)$ nicht normierbar: $\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_{p'}|^2 = \infty$.

Konvention zur Festsetzung von $c$:

$$
\begin{aligned}
\delta(p_1-p_2) \overset{!}{=} \int dx\varphi^*_{p'}(x)\varphi_{p_2}(x) = &\underbrace{|c|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p_1 x}e^{\frac{i}{\hbar}p_2 x}}_{=\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{\frac{i}{\hbar}x(p_2-p_1)}=2\pi\hbar\delta(p_1-p_2)}\\
&= |c^2|2\pi\delta(p_1-p_2)
\end{aligned}
$$

$$
\to c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}
$$

$$\varphi_{p_1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'_x}$$

System im Zustand $\Psi$: Wahrscheinlichkeit den Impuls $p'$ zu messen:

$$\begin{aligned}
W(p') &= |\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*_{p'}(x)\Psi(x)|^2 \\
&= \underbrace{|\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\Psi(x)|^2}_{\text{Fourriertransformierte}=\tilde{\Psi}(p')} \\
&= \underbrace{|\tilde{\Psi}(p')|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeitsdichte}}
\end{aligned}$$

denn

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dp' W(p') &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \tilde{\Psi}^*(p')\tilde{\Psi}(p') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} \Psi^*(x') \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\Psi(x) \\
&= \int dx \int dx' \Psi^*(x)\Psi(x) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p'(x'-x)}}_{=\delta(x-x')} \\
&= \int dx \Psi^*(x)\Psi(x) = \int dx |\Psi(x)|^2 = 1
\end{aligned}$$

---

**Mathematisch:**

$$\int dx|\Psi(x)|^2 = \int dp|\tilde{\Psi}(p)|^2$$

gilt generell für Fourriertransformationen $\to$ Parsevalsches Theorem

### 2.2.5 Impulsraumdarstellung der Wellenfunktion

$\Psi(x,t)$ Wellenfunktion im Ortsraum.

$$\tilde{\Psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\Psi(x,t) \qquad \text{(Wellenfunktion im Impulsraum)}$$

### 2.2.6 Impulsraumdarstellung von Operatoren

$\Psi(x,t)$ Wellenfunktion im Ortsraum.

$$\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x) \quad \hat{p}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

$$A(x,p) \to \hat{A} = A(x, \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\text{konsistent mit} \qquad \left\langle \hat{A} \right\rangle = \int dx \Psi^*(x)\hat{A}\Psi(x)$$

$$\text{Berechnung von Erwartungswert:} \quad \langle \hat{x} \rangle = \int dx |\Psi(x)|^2 x$$

Wirkung von Operatoren direkt im Impulsraum $\tilde{\Psi}(p,t)$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \int dp |\tilde{\Psi}(p)|^2 p = \int dp \tilde{\Psi}^*(p) \underbrace{p\tilde{\Psi}(p)}_{\hat{p}\tilde{\Psi}} \\ &= \int dp \tilde{\Psi}^*(p)\hat{p}\tilde{\Psi}(p) \end{aligned}$$

$$\hat{p}\tilde{\Psi}(p) = p\tilde{\Psi}(p)$$

---

**Fourrier-Rücktransformation**

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\Psi}(p)$$

---

$$\begin{aligned} |\hat{x}| &= \int dx \Psi^*(x) x \Psi(x) \\ &= \int dx \int dp \int dp' \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}xp'} \tilde{\Psi}^*(p') x e^{\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\Psi}(p) \end{aligned}$$

---

$$x e^{\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\Psi}(p) = \tilde{\Psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$$= \int dp \int dp' \tilde{\Psi}^*(p') \tilde{\Psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \underbrace{\int dx \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} x \left(p-p'\right)}}_{\delta(p-p')}$$

$$= \int dp \int dp' \tilde{\Psi}^*(p) \tilde{\Psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \delta(p-p')$$

$$= \int dp \int dp' \tilde{\Psi}^*(p) \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p} \right) \delta(p-p')$$

$$= \int dp \tilde{\Psi}^*(p') \left( - \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}}_{=\hat{x}} \right) \tilde{\Psi}(p) = \langle \hat{x} \rangle$$

Im Impulsraum $\tilde{\Psi}(p)$:

$$\hat{p} \tilde{\Psi}(p) = p \tilde{\Psi}(p)$$

$$\hat{x} \tilde{\Psi}(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\Psi}(p)$$

$$A(x,p) \to \hat{A} \tilde{\Psi}(p) = A(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p) \tilde{\Psi}(p)$$

### 2.2.7 Verallgemeinerung in $3D$

$$\hat{\vec{p}} \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi(\vec{r})$$

$$i = x, y, z \qquad \hat{p}_i \varphi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = p'_j \varphi_{\vec{p}'}(\vec{r})$$

$$\varphi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{2}{3}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \vec{r}}$$

$$W(\vec{r}') = |\int d^3 \varphi^*_{\vec{p}'}(\vec{r}) \Psi(\vec{r})|^2 = |\underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{2}{3}}} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \Psi(\vec{r})}_{\tilde{\Psi}(\vec{p}')}|^2$$

## 2.3 Das freie Teilchen - Wellenpakete

Teilchen mit Masse $m$, eindimensional ohne Kräfte. **Hamiltonoperator:**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \underset{=0}{V(\hat{x})} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x}$$

**Schrödingergleichung**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Separationsansatz $\Psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$

$$\begin{aligned} i\hbar\varphi\frac{d\chi}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} \\ &= i\hbar\underbrace{\frac{1}{\chi}\frac{dx}{dt}}_{t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\frac{1}{\varphi}\frac{d^2\varphi}{dx^2}}_{x} = const = E \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}E\chi \rightarrow \chi(t) = ce^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{\hat{H}}&\varphi(x) = E\varphi(x) \end{aligned}$$

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad \text{(stationäre Schrödingergleichung)}$$

$\rightarrow$ Eigenwertgleichung für $\hat{H}$); $E$ mögliche Energien.
Lößung: $\varphi(x) = ae^{\pm ikx}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx}\varphi(x) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi = E\varphi \rightarrow \frac{\hbar k^2}{2m} = E \qquad E \geq 0$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \geq 0$$

$\rightarrow$ Energie nicht quantisiert.
Zurück zur Separation:

$$\Psi(x,t) = ce^{\pm ikx - \frac{i}{\hbar}Et}$$

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

$$\pm ikx - i\omega(k)t = ce \qquad \text{(Dispersionsrelation)}$$

1. Analogie: el/magn Welle

   $$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t^2}\right)\vec{E} = 0 \qquad \vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(ks-\omega t)} \qquad \omega = ck$$

   el/magn Felder sind reell

   $$\vec{E} = \vec{E}_0\cos(kx - \omega t)$$

   Lösung der Schrödingergleichung: i.A komplex

2. Lösung durch Separationsansatz: $\rightarrow$ $\Psi_t(x,t) = ce^{\pm ikx - i\omega t}$ $\rightarrow$ spezielle Lösung der SG. SG ist linear $\rightarrow$ Linearkombination von Lösungen der SG sind auch Lösungen der SG.

   $$\Psi(x,t) = c_1 e^{i(k_1x-\omega(k)t)} + c_2 e^{i(k_2x-\omega(k)t)}$$

Allgemeine Lösung:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \quad c(k) e^{i(kx-\omega(k)t)} \qquad \text{(Wellenpaket)}$$

3. $\Psi_\pm$ sind Eigenfunktionen des Impulsoperators:

$$\hat{p}\Psi_\pm = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} c e^{\pm ikx - i\omega t} = \pm\hbar k c e^{\pm ikx - i\omega t} = (\pm\hbar k)\,\Psi_\pm = p\Psi_\pm$$
$$p = \pm\hbar k$$

$\Psi_\pm$ beschreibt ein freies Teilchen mit Impuls $p = \pm\hbar k$.

**de Broglie-Relation**

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\frac{|p|}{\hbar}} = \frac{h}{|p|}$$

$\Psi_\pm$: Eigenfunktionen von $\hat{H}$:

$$\hat{H}\Psi_\pm = E\Psi_\pm \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\Psi_\pm$ sind keine Eigenfunktionen des Ortsoperators:

$$\hat{x}\Psi_\pm(x,t) = x\Psi_\pm(x,t) = xce^{\pm ikx - i\omega t} \overset{!}{=} xce^{\pm ikx - i\omega t}$$

→ Fehler! Keine Eigenfunktion.

Impuls fest → Ort vollständig unbestimmt

$$\rho(x,t) = |\Psi_\pm(x,t)|^2 = |ce^{\pm ikx - i\omega t}|^2 = |c|^2$$