

## 7. Grundlagen der Quantenmechanik

Erfolge des Bohr-Modells:

- Erklärung grundlegender Eigenschaften des Spektrums des Wasserstoff-Atoms unter Annahme der Existenz von Materiewellen
- erklärt auch Wasserstoff-ähnliche Einelektron-Atome

Bohr-Modell reicht nicht aus zur Erklärung:

- der Einzelheiten des Spektrums des Wasserstoff-Atoms
  - relative Intensitäten von Spektrallinien
  - Aufspaltung der Spektrallinien in elektrischen/magnetischen Feldern
- von einfachen Mehrelektron-Atomen (z.B. Helium: 2 Elektronen ein Kern)
- der Struktur des periodischen Systems der Elemente
- der Bindung zwischen einzelnen Atomen
- der physikalischen oder chemischen Eigenschaften von einzelnen Atomen

1925-26: Entwicklung der Quantenmechanik

- Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born, Paul Dirac und andere entwickeln einen weiterführenden Ansatz um die Eigenschaften von mikroskopischen Systemen (z.B. Atomen) zu erklären: Die Quantenmechanik.
- **Ziel:** Entwicklung einer Theorie, die die Welleneigenschaften von Teilchen korrekt beschreibt:

schon bis in die 1930er Jahre:

- eine grosse Anzahl von Beobachtungen und Experimenten in der Physik und der Chemie können mit Hilfe der Quantenmechanik erklärt werden
- bis heute hat noch kein Experiment den Vorhersagen der Quantenmechanik widersprochen
- die Quantenmechanik ist eine der erfolgreichsten Theorien überhaupt

## Vorschau: Die grundlegenden Postulate der Quantenmechanik

**1. Postulat:** Der **quantenmechanische Zustand** eines abgeschlossenen Systems lässt sich vollständig durch eine normierte, komplexe Wellenfunktion  $\psi$  beschreiben.

**2. Postulat:** Die **Dynamik** eines abgeschlossenen quantenmechanischen Systems wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

beschrieben, wobei  $H$  der Hamilton-Operator des Systems ist.

**3. Postulat:** In der Quantenmechanik werden **Messungen** durch Operatoren  $M$  beschrieben, die auf die Wellenfunktionen  $\psi$  wirken. Der Mittelwert (Erwartungswert) einer Messgröße für ein quantenmechanisches System im Zustand  $\psi$  ist gegeben durch

$$\langle M \rangle = \int \psi^* M \psi dx .$$

Die möglichen Ergebnisse einzelner Messungen der zum Operator  $M$  gehörenden Messgröße sind die Eigenwerte  $m_n$  des Operators mit den Quantenzahlen  $n$  und den zugehörigen Eigenfunktionen  $\psi_n$

$$M \psi_n = m_n \psi_n .$$

**4. Postulat:** Der quantenmechanische Zustand  $\psi$  eines **aus  $n$  Teilsystemen bestehenden Gesamtsystems** wird durch ein Tensor-Produkt der Wellenfunktionen  $\psi_i$  der Teilsysteme beschrieben.

$$\Psi = \psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \psi_3 \otimes \dots \otimes \psi_n$$

**siehe auch:** Kapitel 9, Haken & Wolf; Kapitel 5, Beiser; Kapitel 2, Nielsen & Chuang

## 7.1 Die Wellenfunktion

- allgemeine Einführung einer komplexen Wellenfunktion  $\psi$  zur Beschreibung der quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens

$$\psi = A + iB \quad i = \sqrt{-1}, i^2 = -1$$

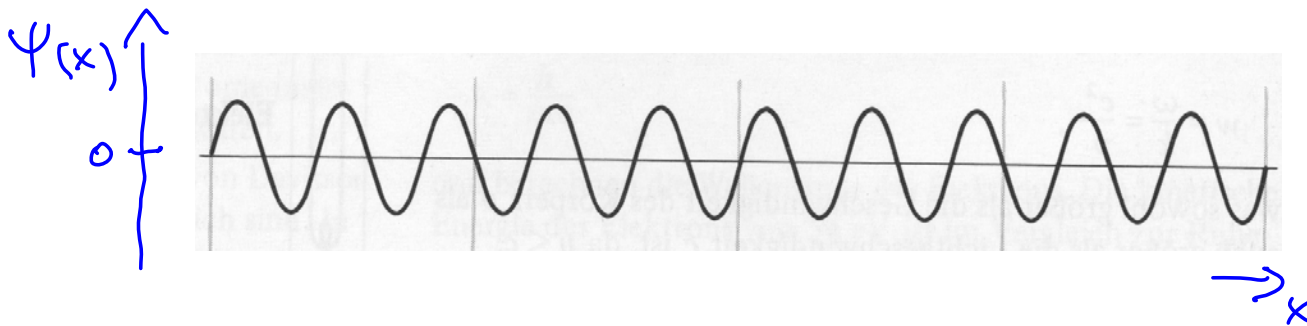
- Das Quadrat des Betrags von  $\psi$  ausgewertet an einer gegebenen Koordinate  $x$  ist proportional zur **Wahrscheinlichkeitsdichte**  $P$  das Teilchen an dem Ort  $x$  zur Zeit  $t$  zu finden

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = (A + iB)(A - iB) = A^2 + B^2 = \rho$$

- $\psi^*$  ist die zu  $\psi$  komplex konjugierte Wellenfunktion

$$\psi^* = A - iB$$

- ebene Welle



## Eigenschaften der Wellenfunktion $\psi$

- **Normierung der Wellenfunktion:** Für ein Teilchen mit gültiger Wellenfunktion  $\psi$  und Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  muss die Gesamtwahrscheinlichkeit das Teilchen an einem beliebigen Ort im Raum zu finden gerade gleich 1 sein. Dann ist die Wellenfunktion normiert.

$$\int |\psi|^2 dV = \int \rho dV = P = 1$$

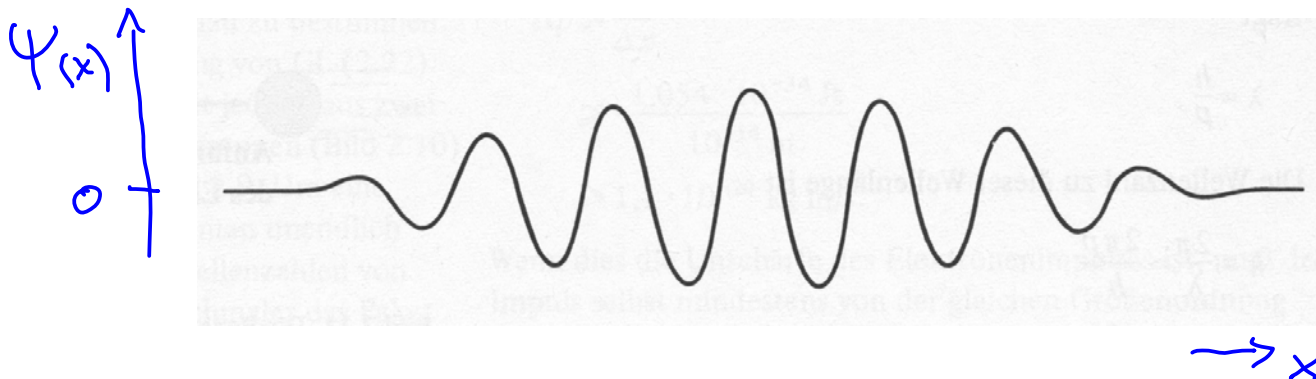
- die Wellenfunktion  $\psi$  ist **eindeutig** und **stetig**
- die Ableitungen der Wellenfunktion  $\psi$  sind ebenfalls **eindeutig** und **stetig**

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

- **räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit** eines Teilchens (in einer Dimension):

$$P_{x_1, x_2} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx$$

- Wellenpaket

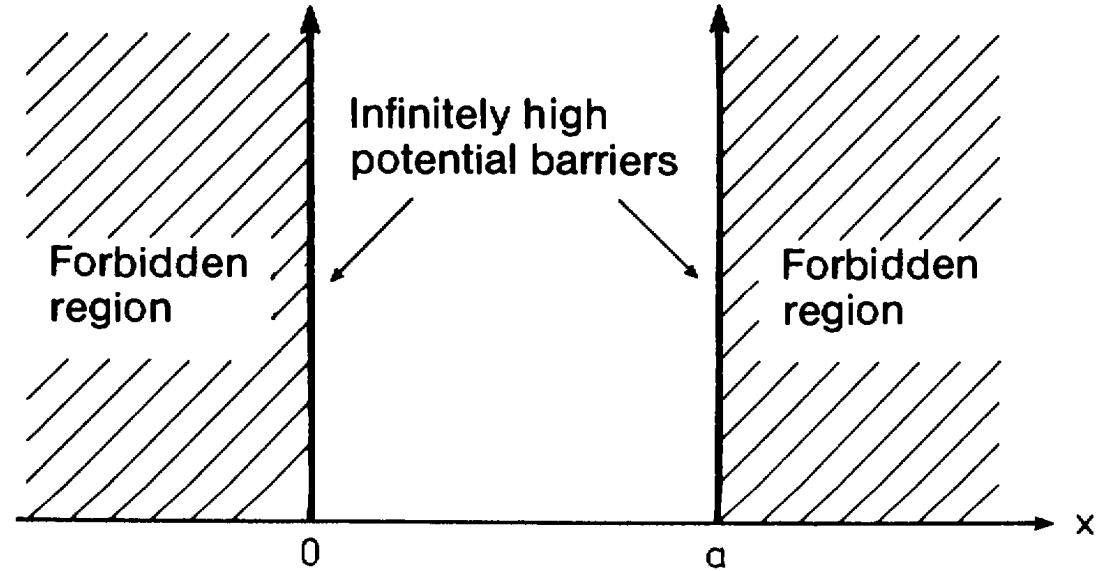


## 7.1.1 Teilchen in einem Potentialtopf

ein weiteres Beispiel zur Lösung eines quantenmechanischen Problems mit dem Postulat der Materiewellen

- betrachte ein einzelnes Teilchen (z.B. ein Elektron) in einem 1D Potentialtopf

- die Bewegung des Teilchens entlang der  $x$ -Richtung ist durch harte Wände in den Positionen  $x = 0$  und  $x = a$  eingeschränkt
- diese Tatsache wird durch eine Potential  $U$  mit  $U = 0$  für  $0 < x < a$  und  $U = \infty$  an allen übrigen Orten beschrieben
- betrachte Teilchen als Materiewelle



- für freies Teilchen:

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$E = \hbar \omega = h \nu$$

de Broglie

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

klassische Beziehung zwischen Energie und Impuls

$$E = p^2 / 2m_0 \quad \Rightarrow \quad p = \pm \sqrt{2m_0 E}$$

- mögliche dem Impuls  $p$  zugeordnete Werte des Wellenvektors  $k$

$$k = \frac{p}{\hbar} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0 E}$$

- stehende Welle als Superposition zweier Materiewellen

$$\Psi(x,t) = (C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}) e^{-i\omega t}$$

$$= \psi(x) e^{-i\omega t}$$

- Randbedingungen für Materiewelle im Potentialtopf

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow C_1 + C_2 = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = 2i C_1 \sin(kx)$$

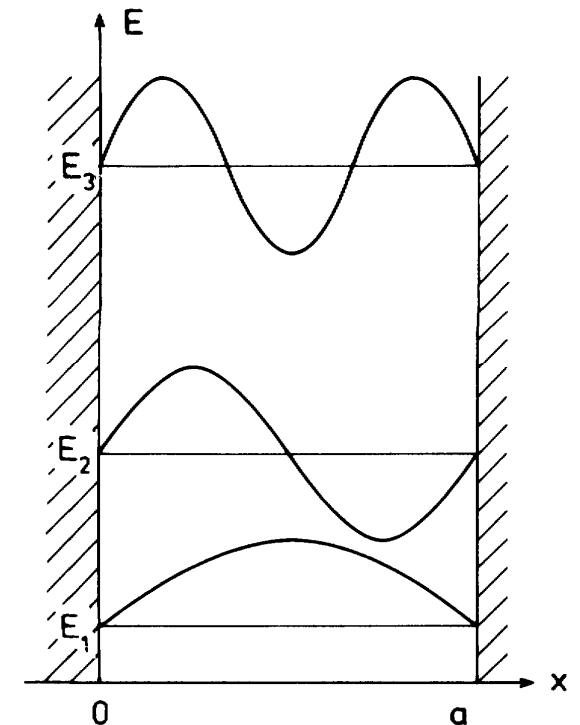
$$\psi(a) = 0 \Rightarrow \sin ka = 0$$

$$\Rightarrow k = n \frac{\pi}{a}$$

- Energie des Teilchens mit dieser Quantisierungsbedingung:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( n \frac{\pi}{a} \right)^2$$

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



Bestimmung der Konstanten  $C_1$ :

- Normierungsbedingung:

$$\int \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$
$$\Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

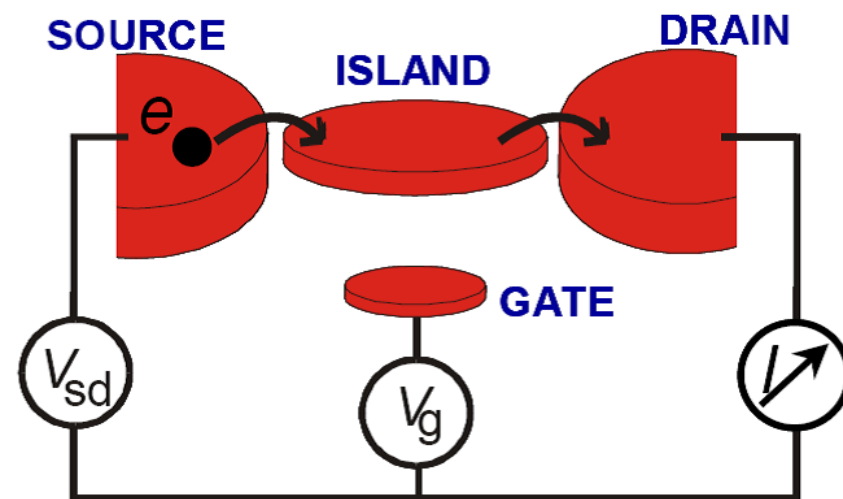
- zur Quantenzahl  $n$  gehörende Wellenfunktion:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} i \sin\left(n x \frac{\pi}{a}\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2a}} \left( e^{i \frac{n\pi}{a} x} - e^{-i \frac{n\pi}{a} x} \right)$$
$$\begin{array}{ccc} \uparrow & & \uparrow \\ k = \frac{n\pi}{a} & & k = -\frac{n\pi}{a} \end{array}$$

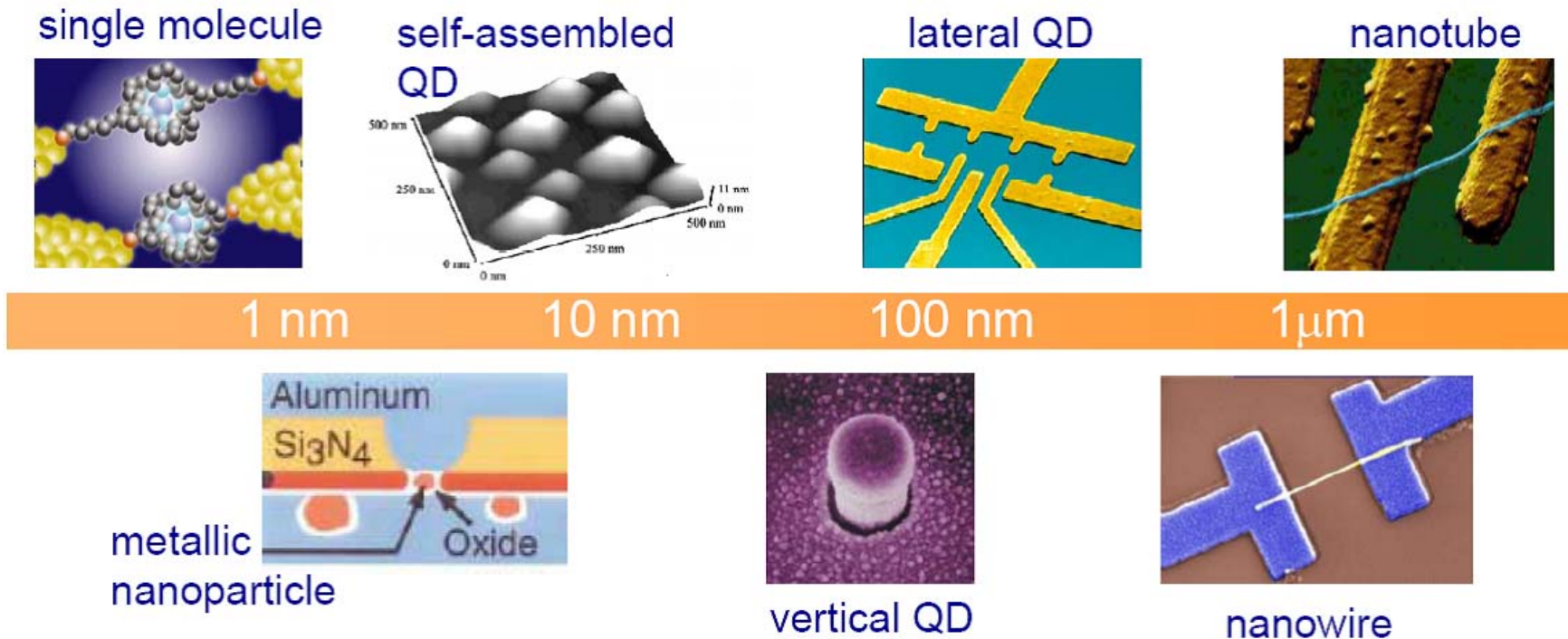
Überlagerung zweier  $k$ -Vektoren mit unterschiedlichem Vorzeichen also zweier Impulse  $p$  mit unterschiedlicher Richtung

## 7.1.2 Quantenpunkte: Elektronen im Potentialtopf

- Aufbau:
- kleine metallische oder halbleitende Insel für Elektronen
  - diskrete Elektron-Energieniveaus
  - Kopplung an Elektronen-Quelle (source) oder Senke (drain) durch Tunnelkontakte
  - Kopplung an Gatter-Elektrode zur Einstellung der Anzahl Elektronen



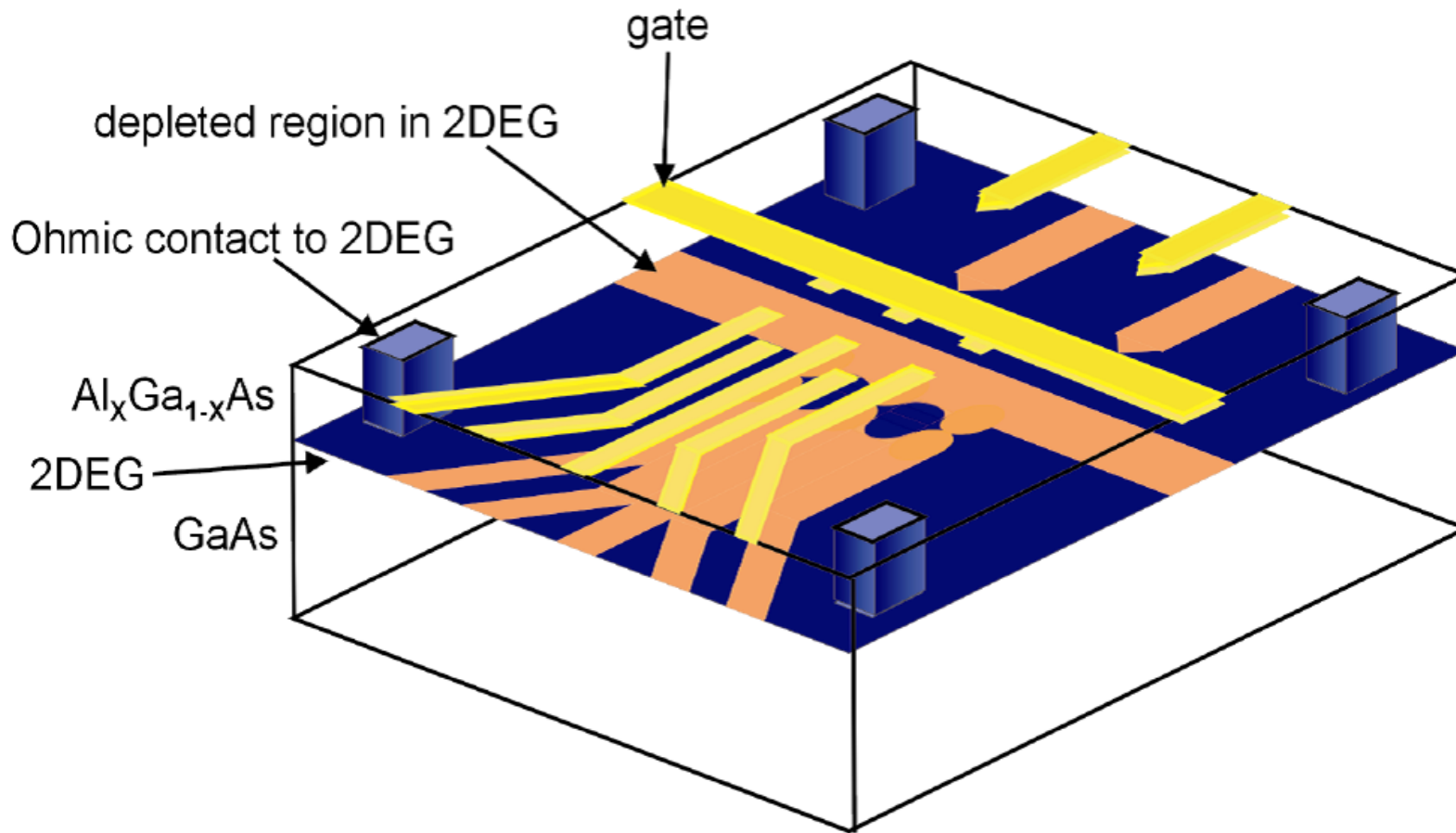
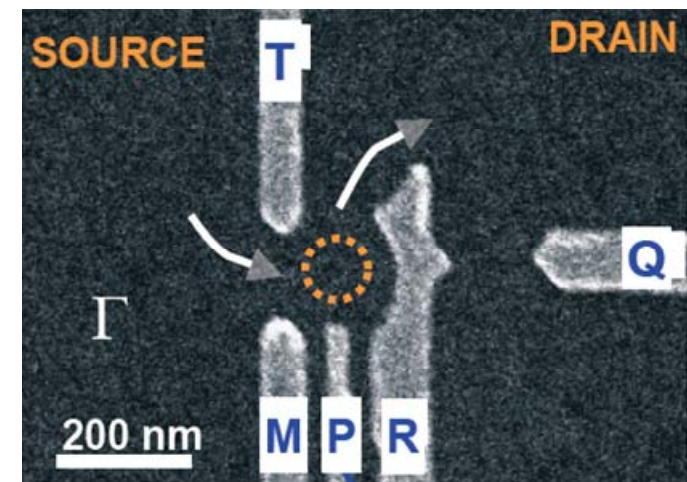
verschiedene physikalische Realisierungen von Quantenpunkten:





## Elektrostatisch definierte Quantenpunkte in zweidimensionalen Elektronengasen (2DEG)

- Isolierung einzelner Elektronen auf einem Chip
- elektrische Kontrolle einzelner Elektronen
- elektrische Messung einzelner Elektronen



## 7.2 Erwartungswerte

- alle Informationen über ein Teilchen sind in seiner Wellenfunktion  $\psi$  enthalten
- wir wissen bereits wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens an einem Ort mit einer gewissen Koordinate bestimmt wird
- um andere experimentell erfassbaren Größen zu bestimmen werden **Erwartungswerte** berechnet

Beispiel aus der klassischen Physik:

- Schwerpunkt einer Ansammlung von  $N$  Teilchen mit jeweils  $N_i$  Teilchen bei der Koordinate  $x_i$

$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + \dots + N_m x_m}{N_1 + N_2 + \dots + N_m} = \frac{\sum x_i N_i}{\sum N_i}$$

### Quantenmechanischer Erwartungswert des Ortes:

- für ein einzelnes Teilchen, das sich mit der Wahrscheinlichkeit  $p_i$  an der Position  $x_i$  befindet

$$\bar{x} = \frac{p_1 x_1 + \dots + p_m x_m}{p_1 + \dots + p_m} = \frac{\sum p_i x_i}{\sum p_i}$$

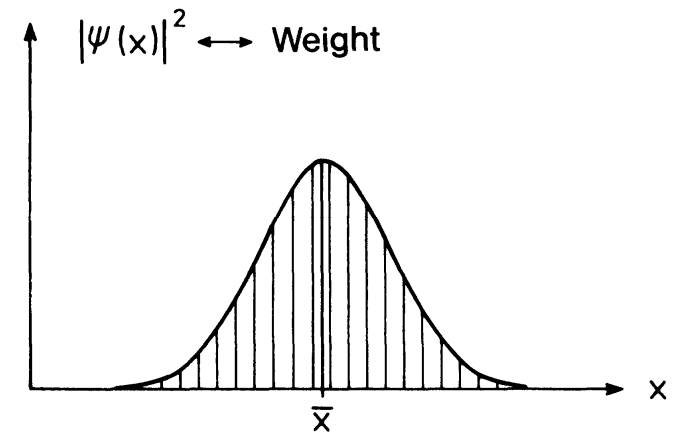
mit  $p_i = |\psi_i|^2 dx_i$

- im kontinuierlichen Grenzfall

$$\bar{x} = \frac{\int x |\psi|^2 dx}{\int |\psi|^2 dx} \cong \langle x \rangle$$

Allgemeiner: Erwartungswert einer Größe  $G(x)$  (die kein Operator ist)

$$\langle G(x) \rangle = \int G(x) |\psi|^2 dx$$



## Erwartungswert des Impulses

- betrachte Wellenpaket

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(p) \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{ix}{h} p} dp$$

und die Zerlegung der Wellenfunktion  $\psi$  nach ebenen Wellen

- $|c(p)|^2 dp$  entspricht der Wahrscheinlichkeit ein Teilchen mit Impuls  $p$  im Intervall  $p + dp$  zu finden
- Mittelwert des Impuls  $p$

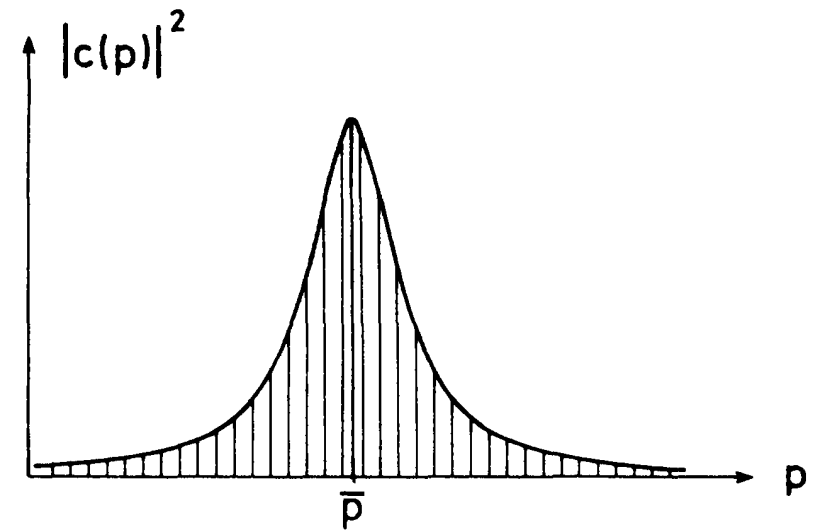
$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p |c(p)|^2 dp$$

Problem: zur Berechnung des Mittelwertes des Impulses muss die Zerlegung der Wellenfunktion  $\psi(x)$  nach ebenen Wellen mit Impuls  $p$  bekannt sein.

- Einfacherer Lösungsansatz für eine beliebige Wellenfunktion  $\psi(x)$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \int \psi^* \underbrace{\left( \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)}_{\text{Impulsoperator}} \psi dx$$

Impulsoperator



## 7.3 Operatoren für den Impuls $p$ und die Energie $E$ und ihre Erwartungswerte

- Ableitung der Wellenfunktion  $\psi$  eines freien Teilchen nach dem Ort  $x$  und der Zeit  $t$

$$\Psi(x,t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \Psi \quad \Rightarrow \quad p \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad \Rightarrow \quad E \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

### Quantenmechanische Operatoren:

Impuls/Orts-Operator:  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad ; \quad \hat{x} = x$

Energie-Operator:  $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Gesamtenergie-Operator:  $\hat{E} = \hat{E}_{kin} + \hat{u} \quad \text{mit} \quad \hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad ; \quad \hat{u}(x) = u(x)$

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

Schrödinger-Gleichung folgt aus dem Hamilton-Operator und dem Gesamtenergie-Operator durch Multiplikation mit der Wellenfunktion  $\psi$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + u \psi$$

### 7.3.1 Erwartungswert eines beliebigen Operators $\hat{O}$

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \psi^* \hat{O} \psi dx$$

### 7.3.2 Beispiel: Erwartungswert des Impulses eines freien Teilchens

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \int \psi^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi dx \quad \text{mit} \quad \psi = A e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{E}{c} - p_x x)} \\ &= \int \psi^* p_x \psi dx = p_x \int \psi^* \psi dx = p_x \end{aligned}$$

### 7.3.3 Beispiel: Orts- und Impuls-Erwartungswerte für ein Teilchen im Potentialtopf

- Erwartungswert des Ortes  $\langle x \rangle$

$$\langle x \rangle = \int_0^L \psi^* x \psi dx = \int_0^L x \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{L}{2}$$

- Erwartungswert des Impuls  $\langle p \rangle$

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} dx \\ &= i\hbar \frac{n^2\pi^2}{L^2} \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = 0 \end{aligned}$$

Der Impuls-Erwartungswert verschwindet. Warum?

- aus bekannter Energie  $E = p^2/2m$  erwarteter Impuls  $p$

$$p_m^\pm = \pm \sqrt{2mE_n} = \pm \frac{n\pi\hbar}{L}$$

- mittlerer Impuls

$$p = \frac{p_m^+ + p_m^-}{2} = 0$$

## 7.4 Die Schrödinger-Gleichung

- die grundlegende Gleichung der Quantenmechanik
  - (in den bis jetzt diskutierten Fällen) eine Wellengleichung für Materiewellen (gilt aber auch allgemeiner)
  - sie wird postuliert und lässt sich nicht herleiten (wie andere grundlegende Gesetzmässigkeiten: Hauptsätze der Thermodynamik, Newtonsche Bewegungsgleichung, ...)
- Erinnerung: Verwendung von Wellengleichungen in der Mechanik, Elektrodynamik etc.
- Hier: Bestimme die fundamentale Differentialgleichung für welche die Wellenfunktion die quantenmechanischen Teilcheneigenschaften korrekt beschreibt.
- betrachte die Wellenfunktion eines **freien Teilchens** (in einer Dimension) gegeben durch eine ebene Welle entlang der  $x$ -Richtung mit Ausbreitungsgeschwindigkeit  $v = \lambda \nu$

$$\Psi = A e^{-i\omega(t - \frac{x}{v})} = A e^{-2\pi i (\nu t - \frac{x}{\lambda})}$$

- $\nu$  und  $\lambda$  ausgedrückt in Energie  $E$  und Impuls  $p$

$$E = h\nu \quad ; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

- somit

$$\Psi = A e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - px)}$$

mit der reduzierten Planck-Konstanten

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

### 7.4.1 Begründung der Struktur der **Schrödinger-Gleichung**:

- finde Wellengleichung für  $\psi$  durch Differentiation der Wellenfunktion für ein freies Teilchen  $\psi$  nach dem Ort  $x$  ...

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (\Leftrightarrow) \quad p^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \psi$$

... und nach der Zeit  $t$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi \quad (\Leftrightarrow) \quad E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- für ein nicht-relativistisches Teilchen ( $v < c$ ) ist die Gesamtenergie gegeben durch

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$$

- Multiplikation mit  $\psi$

$$E\psi = \frac{p^2}{2m} \psi + U(x,t)\psi$$

- Ersetzen der Ausdrücke für **E** und **p**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x,t) \psi$$

kinetische  
Energie

potentielle  
Energie

dies ist die zeitabhängige  
**Schrödinger-Gleichung**  
in einer Dimension (1D)

- für  $U = 0$  beschreibt sie ein freies Teilchen



- in drei Dimensionen (3D):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\nabla^2 = \Delta} \Psi + U(x, y, z, t) \Psi$$

Laplace-Operator

Bemerkungen:

- das Potential  $U$  beschreibt alle externen Kräfte auf das Teilchen
- durch Lösung der Schrödinger-Gleichung kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Teilchens aus der Wellenfunktion  $\psi$  für jeden Ort  $x$  und jede Zeit  $t$  bestimmt werden.

Nocheinmal:

- Die Schrödinger-Gleichung ist ein Postulat.
- Quantenmechanische physikalische Effekte, die in Experimenten beobachtet werden, sind exzellent durch diese Gleichung beschrieben.
- Es gibt keine formale Herleitung für diese Gleichung

## 7.4.2 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

- in vielen Problemen der Quantenmechanik hängt das Potential  $U$  nicht explizit von der Zeit  $t$  ab
- in diesen Fällen lässt sich die Schrödinger-Gleichung vereinfachen
- für die Wellenfunktion eines freien Teilchens gilt zum Beispiel:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}px} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tilde{\psi}(x)$$

- es stellt sich heraus, dass die Wellenfunktion für alle zeitunabhängigen Probleme auf diese Art und Weise separiert werden kann
- Die Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + U(x) \psi(x,t)$$

$$\Rightarrow E \tilde{\psi}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\psi}(x) \right) + e^{-\frac{i}{\hbar}Et} U(x) \tilde{\psi}(x)$$

$$\Rightarrow (E - U(x)) \tilde{\psi}(x) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\psi}(x) = 0$$

- in drei Dimensionen (3D)

$$(E - U) \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = 0$$

- Eine solche zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung kann eine oder mehrere Lösungen  $\psi_i$  besitzen.
- Die zu den verschiedenen Lösungen  $\psi_i$  gehörenden Energien  $E_i$  erklären auf natürliche Art die Quantisierung der Energie, die in stabilen zeitunabhängigen Systemen experimentell beobachtet wird

### 7.4.3 Der Hamilton-Operator

Der Gesamtenergie-Operator  $E$  eines quantenmechanischen System kann mittels des Impuls  $p$  und des potentiellen Energie-Operatoren  $U$  ausgedrückt werden

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) = \hat{H}$$

Dieser Operator wird dann der **Hamilton-Operator**  $H$  des Systems genannt.

zeitabhängige und ...

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

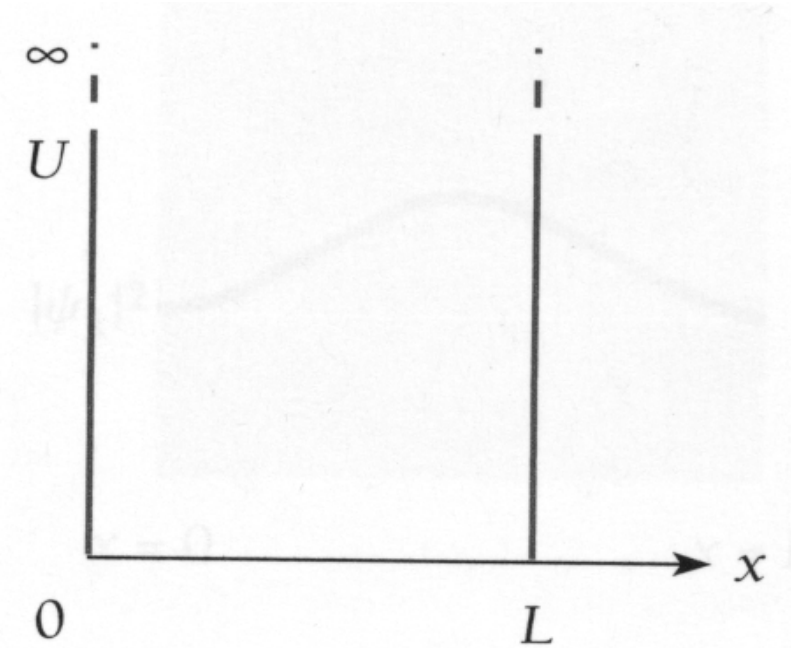
... zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

## 7.4.4 Teilchen in einem Potentialtopf gelöst mit der Schrödinger-Gleichung

ein einfaches Beispiel zur Anwendung der Schrödinger-Gleichung

- betrachte ein einzelnes Teilchen (z.B. ein Elektron) in einem 1D Potentialtopf (3D in den Übungen),  
Eigenschaften des Potentials  $U$ :
- die Bewegung des Teilchens entlang der  $x$ -Richtung ist durch harte Wände in den Positionen  $x = 0$  und  $x = L$  eingeschränkt
- diese Tatsache wird durch eine Potential  $U$  mit  $U = 0$  für  $0 < x < L$  und  $U = \infty$  an allen übrigen Orten beschrieben



## Bestimme die Wellenfunktion $\psi$ des Teilchens im Potentialtopf durch Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

- gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung für  $\psi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E \psi \quad \text{for } 0 < x < L$$

- allgemeine Lösung:

$$\psi = A \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + B \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$$

- Randbedingungen  $\psi = 0$  für  $x < 0$  und  $x > L$ :

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

$$\psi(L) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

- erlaubte Energien  $E_n$  eines Teilchens mit der Quantenzahl  $n$  in einem Potentialtopf

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad \text{for } n = 1, 2, 3, \dots$$

- die unnormierte Wellenfunktion  $\psi_n$  zur Quantenzahl  $n$

$$\Psi_n = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

- Normierungsbedingung

$$\int_0^L |\Psi_n|^2 dx = \int_0^L A^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1$$

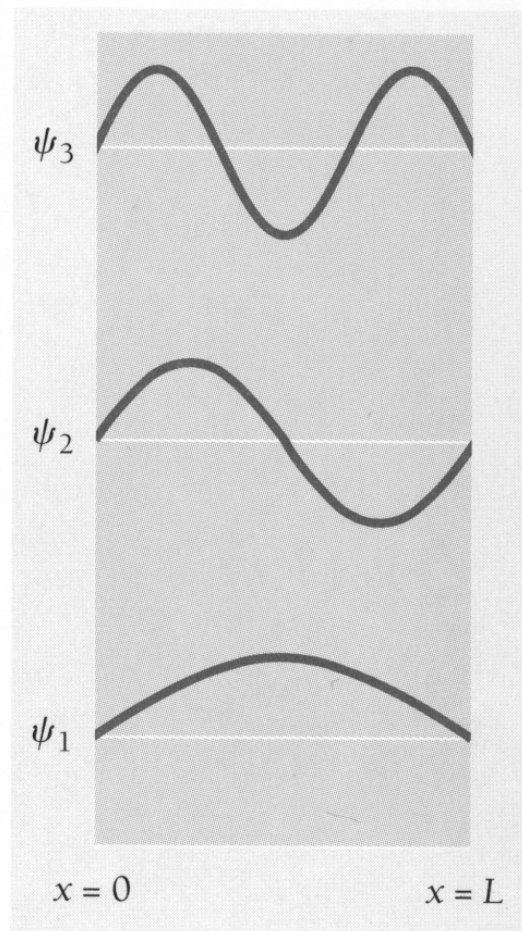
$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

- normierte Wellenfunktion  $\psi$

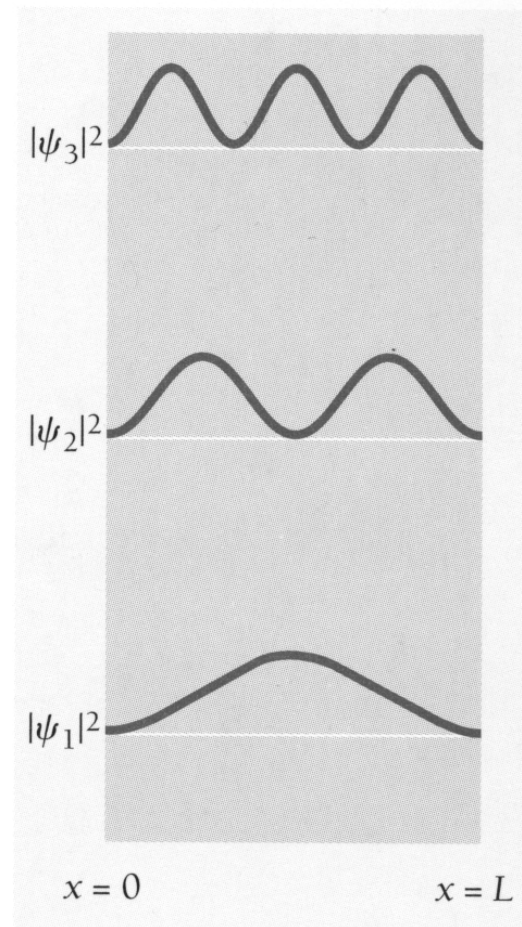
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

# Abbildung der Wellenfunktion für verschiedenen Hauptquantenzahlen $n$ :

- Wellenfunktionen  $\psi_n$



- zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichten  $|\psi_n|^2$



- Bemerkungen:
- Wahrscheinlichkeitsdichten hängen stark von  $n$  ab
  - $n = 1$ : höchste Wahrscheinlichkeitsdichte im Zentrum ( $x = L/2$ )
  - $n = 2$ : niedrigste Wahrscheinlichkeitsdichte im Zentrum
  - klassisch Wahrscheinlichkeitsdichte ist konstant

## 7.5 Eigenfunktionen und Eigenwerte von Operatoren:

- wir betrachten einen quantenmechanischen Operator  $O$
- wenn für diesen folgende Gleichung gilt:

$$\hat{O} \psi_n = o_n \psi_n$$

dann ist  $\psi_n$  eine Eigenfunktion des Operators  $O$  mit dem Eigenwert  $o_n$

- eine solche Gleichung wird Eigenwertgleichung genannt
- sie ist die Bestimmungsgleichung für die Wellenfunktion  $\psi$

### 7.7.1 Impuls-Eigenfunktionen

- Eigenwertgleichung für den Impuls  $p$

$$\hat{p} \psi_n = p \psi_n \quad \text{with} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

#### Beispiel: Impuls-Eigenfunktionen für das Teilchen im Potentialtopf

- Impuls Eigenfunktionen

$$\psi_n^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{\pm i \frac{n\pi x}{L}}$$

- Impuls-Eigenwerte

$$p_n^{\pm} = \pm \frac{n\pi\hbar}{L}$$

- Energie-Eigenfunktionen des Teilchens im Potentialtopf sind offensichtlich keine Impuls-Eigenfunktionen.



## 7.6 Die Quantenmechanische Messung

- betrachte Wellenfunktion  $\psi_n$ , die Eigenfunktion des Operators  $A$  mit Eigenwert  $a_n$  ist.

$$\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$$

- Bestimme den Erwartungswert des Operators  $A$ , d.h. den Mittelwert der zu  $A$  gehörenden Messgröße, wenn sich das quantenmechanische System im Zustand  $\psi_n$  befindet.

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int \psi^* \hat{A} \psi \, dx = a_n \int \psi_n^* \psi_n \, dx \\ &= a_n \end{aligned}$$

In diesem Fall entspricht der messbare Erwartungswert  $\langle A \rangle$  gerade dem Eigenwert  $a_n$  von  $A$ .

### Postulat:

**Wenn eine physikalische Grösse, die zu einem Operator  $A$  eines quantenmechanischen Systems gehört, gemessen wird, dann ist das einzig mögliche Messresultat einer der Eigenwerte  $a_n$  von  $A$ .**

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist eine Eigenwertgleichung für den Hamiltonoperator  $H$ .

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$$

Die sogenannten Eigen-Energien  $E_n$  des durch den Hamilton-Operator  $H$  beschriebenen Systems entsprechen gerade den quantisierten möglichen Energien des Systems

## 7.7 Gleichzeitige Eigenfunktionen, Messbarkeit und Kommutatoren

- Wann lassen sich zwei durch Operatoren repräsentierte physikalische Größen einer Wellenfunktion  $\psi_n$  gleichzeitig beliebig genau messen?
- betrachte zwei Operatoren  $A$  und  $B$  mit **gleichzeitigen** Eigenfunktionen  $\psi_n$  und Eigenwerten  $a_n$  und  $b_n$

$$\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$$

$$\hat{B} \psi_n = b_n \psi_n$$

- berechne Differenz zwischen zwei Messungen mit vertauschter Reihenfolge ( $A$  dann  $B$  und  $B$  dann  $A$ )
- wende  $A$  auf die zweite Gleichung und  $B$  auf die erste Gleichung an und subtrahiere sie voneinander

$$\begin{aligned} \hat{A} \hat{B} \psi_n - \hat{B} \hat{A} \psi_n &= b_n \hat{A} \psi_n - a_n \hat{B} \psi_n \\ &= (b_n a_n - a_n b_n) \psi_n = 0 \end{aligned}$$

- **Kommutator Relation**

$$(\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \psi_n = [\hat{A}, \hat{B}] \psi_n = 0$$

Wenn eine solche Relation für die Operatoren  $A$  und  $B$  gilt, dann existieren gleichzeitige Eigenfunktionen  $\psi_n$  und die Eigenwerte von  $A$  und  $B$  können gleichzeitig beliebig genau gemessen werden.

## 7.7.1 Beispiele für Kommutatoren

- Impuls und kinetische Energie

$$[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}] = 0$$

- Ort und Impuls

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

dies ist die Heisenbergsche Vertauschungsrelation:

Ort und Impuls lassen sich nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmen

Wenn die Kommutator-Relation

$$[\hat{A}, \hat{B}] \psi_n \neq 0$$

für zwei Operatoren  $A$  und  $B$  gilt, so gibt es keine gemeinsamen Eigenfunktionen  $\psi_n$  der beiden Operatoren und die zugehörigen Messgrößen können nicht gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden.

## 7.8 Das Superpositionsprinzip in der Quantenmechanik

- die Schrödinger-Gleichung ist **linear in der Wellenfunktion**  $\psi$
- sie enthält keine Ausdrücke höherer Potenzen von  $\psi$  oder ihrer Ableitungen
- sind  $\psi_1$  und  $\psi_2$  Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so sind auch ihre **Superpositionen (Überlagerungen)** Lösungen der selben Gleichung

$$\Psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 \quad \text{mit } |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

- $a_1$  und  $a_2$  sind komplexe Koeffizienten
- das Superpositionsprinzip gilt für Materiewellen und auch allgemeiner für beliebige quantenmechanische Zustände
- das Superpositionsprinzip ist verantwortlich für die in der Quantenmechanik beobachteten Interferenzeffekte

formales Beispiel:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = (a_1^* \psi_1^* + a_2^* \psi_2^*) (a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2)$$

von nur einer Wellenfunktion  
abhängende Terme

$$= a_1^* a_1 \psi_1^* \psi_1 + a_2^* a_2 \psi_2^* \psi_2$$

von beiden Wellenfunktionen  
abhängende Interferenzterme

$$+ a_1^* a_2 \psi_1^* \psi_2 + a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^*$$