Welle-Teilchen-Dualismus

Einstein 1905: "Lichtquanten"

$$E = \hbar\omega \;;\; \vec{p} = \hbar\vec{k} \;;\; \omega = c|\vec{k}|$$

De Broglie: Teilchen haben Welleneigenschaften

$$E = \hbar\omega = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \;;\; \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}$$

Schrödinger: Wellengleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(t,\vec{x}) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\psi \quad \text{(freies Teilchen)}$$

$$\psi(t,\vec{x}) = \psi_0 \exp[-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}]$$

$$\Rightarrow i\hbar(-i\omega)\psi_0 \cancel{\exp[\cdots]} = -\underset{\cdot\hbar^2/(2m)}{(i\vec{k}\cdot i\vec{k})}\psi_0 \cancel{\exp(\cdots)}$$

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

Phys. Bedeutung von $\psi(t,\vec{x})$ (Born 1926)

$$P(t,\vec{x}) = |\psi(t,\vec{x})|^2$$

Wahrscheinlichkeitsdichte für Ort des Teilchens zur Zeit t:

$d^3x\, P(t,\vec{x})$ Wsk. Teilchen im Volumenelement d^3x am Ort $\vec{x}$ zu finden

Observablen: beschrieben durch selbstadj. Op.

$$\langle \psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x\, \psi_1^*(t,\vec{x})\, \psi_2(t,\vec{x})$$

Operator $\hat{A}$: lineare Abb: $\hat{A}(\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2)=\lambda_1\hat{A}\psi_1+\lambda_2\hat{A}\psi_2$

Selbstadj: $\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle$

↳ $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

Eigenfunktionen von $\hat{A}$: $\hat{A}u_a(\vec{x}) = \underset{\underset{\text{Eigenwert}}{\uparrow}}{a}\, \overset{\overset{\text{Eigenfunktion}}{\downarrow}}{u_a}(\vec{x})$

EWe: mögliche Messwerte der Observablen, die mit $\hat{A}$ beschrieben wird.

$\psi(t,\vec{x})$: Zustand des Teilchens

$P(a,t)=|\langle u_a|\psi(t)\rangle|^2$

Dabei muss:

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

$$\langle u_a|u_{a'}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x\, u_a^*(\vec{x})\, u_{a'}(\vec{x}) = \delta_{aa'}$$

$$\sum_a P(a,t) = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$$

Vollst. der Eigenfunktion von selbstadj. Op.:

$$\psi(t,\vec{x}) = \sum_a \psi_a(t)\, u_a(\vec{x}) \quad \text{mit} \quad \psi_a(t)=\langle u_a|\psi(t)\rangle$$

Ortsoperator: $\hat{\vec{x}}\,\psi(t,\vec{x}) = \vec{x}\,\psi(t,\vec{x})$

Impulsoperator: $\hat{\vec{p}}\,\psi(t,\vec{x}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(t,\vec{x})$

$$\langle \psi_1 | \hat{\vec{p}}\,\psi_2 \rangle = \langle \hat{\vec{p}}\,\psi_1 | \psi_2 \rangle$$

Impulseigenfunktionen:

$$\hat{\vec{p}}\,u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \vec{p}\,u_{\vec{p}}(\vec{x}) \; ; \quad \vec{p} \in \mathbb{R}^3$$

$$u_{\vec{p}} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left(i\,\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar\right)$$

$$\langle u_{\vec{p}} | u_{\vec{p}'} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \exp\left(\frac{-i\,\vec{p}\cdot\vec{x} + i\,\vec{p}'\cdot\vec{x}}{\hbar}\right)$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}')$$

Bahndrehimpuls: $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \vec{x} \times (-i\hbar\vec{\nabla})$

$$= -i\hbar\,\vec{x} \times \vec{\nabla}$$

Kommutatoren:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \; [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \; ; \; [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\,\delta_{jk}$$

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\,\varepsilon_{jkl}\,\hat{L}_l \; ;$$

Simultane Drehimpuls-Eigenzustände $\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_3$

$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ Kugelflächenfunktion

$$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \,\sin\vartheta\; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

$l \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$; $\hat{\vec{L}}^2$ EVe: $\hbar^2 l(l+1)$

$m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ $\hat{L}_3$ EVe: $\hbar m$

Schrödinger-Gl.

$$i\hbar \partial_t \psi(t,\vec{x}) = \hat{H}\psi(t,\vec{x})$$

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

Zeitentwicklung der Wellenfunktion

Anfangsbed.: $\psi(t=0, \vec{x}) = \psi_0(\vec{x})$

Energie-Eigenfunktionen: $\hat{H} u_E(\vec{x}) = E u_E(\vec{x})$

$$\psi_0(\vec{x}) = u_E(\vec{x})$$

$$i\hbar \partial_t \psi(t,\vec{x}) = \hat{H}\psi(t,\vec{x})$$

$$\psi(t,\vec{x}) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) u_E(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\partial_t \psi(t,\vec{x}) = E \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) u_E(\vec{x}) = E\psi(t,\vec{x})$$

$$\hat{H}\psi(t,\vec{x}) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \hat{H} u_E(\vec{x})$$

$$= \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) E u_E(\vec{x}) = E\psi(t,\vec{x})$$

Dann:

$$P(t,\vec{x}) = |\psi(t,\vec{x})|^2 = |u_E(\vec{x})|^2$$

$\Rightarrow$ Energieeigenzustände = stationäre Zustände

$$\psi(t,\vec{x}) = \sum_E \psi_E \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) u_E(\vec{x})$$

$$\psi_E = \langle u_E | \psi(0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, u_E^*(\vec{x}) \, \psi_0(\vec{x})$$

Bsp.: Freie Teilchen

$$u_E(\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right)$$

$$E = E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Bsp.: harmonischer Oszi.:

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

Energie-Eigenwerte

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) ; \quad n \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$$

Bsp.: Wasserstoffatom

Energie-Eigenfunktion:

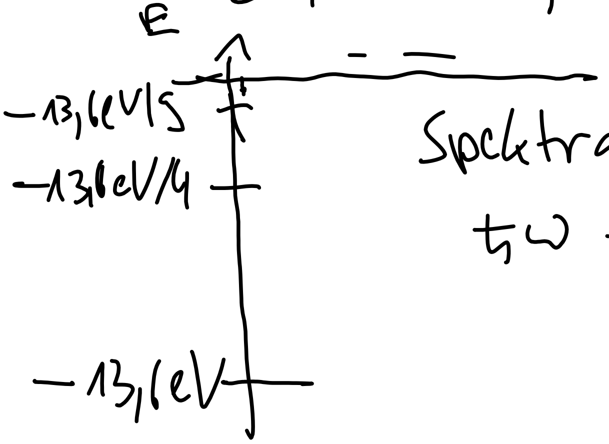
$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$; simultane Efn. von $\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$

$$u_{Elm}(\vec{x}) = R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{H} u_{Elm} = E_n u_{Elm} ; \quad E_n = -\frac{\hbar^2}{2 m_e a_B^2 n^2} \hat{=} -\frac{13{,}6\,eV}{n^2}$$

Bohr-Radius: $a_b = \frac{\hbar}{\alpha m c}$; $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$

$n \in \{1, 2, \dots\} = \mathbb{N}$



Spektrallinien

$$\hbar\omega = E_{n_1} - E_{n_2} = -13{,}6\,eV\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$l \in \mathbb{N}_0$; $m \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$

für jedes n: E_n ist n^2-fach entartet

Unschärfe-Relation

$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|$; $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\,\delta_{jk}\hat{1}$

Bsp. $\hat{x}_j, \hat{p}_k$: $\Delta x_j \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{jk}$