

# Welle-Teilchen-Dualismus

(1)

Einstein 1905: "Lichtquanten"

$$E = h\nu; \vec{p} = h\vec{k}; \nu = c|\vec{k}|$$

De Broglie: Teilchen haben Welleneigenschaften

$$E = h\nu = \frac{\vec{p}^2}{2m}; \vec{p} = h\vec{k}$$
$$h\nu = \frac{h^2 \vec{k}^2}{2m} \Rightarrow \nu = \frac{h \vec{k}^2}{2m}$$

Schwingung: Wellengleichung

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

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

$$\Rightarrow i\hbar (-i\nu) \psi_0 \exp[\dots] = -\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \psi_0 \exp[\dots]$$
$$h\nu = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

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 in Volumenelement  $d^3x$  am Ort  $\vec{x}$  zu finden

Observablen: beschrieben durch selbstadj. Op.

(2)

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

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

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

$$\hookrightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

Eigenfunktionen von  $\hat{A}$ :  $\hat{A} \psi_a(\vec{x}) = a \psi_a(\vec{x})$   
Eigenfunktion

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

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

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

Dabei muss:

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

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

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

Vollst. der Eigenfunktionen von selbstadj. Op.:

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

Ortsoperator:  $\hat{\vec{x}} \psi(t, \vec{x}) = \vec{x} \psi(t, \vec{x})$  (3)

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

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

Impuls eigenfunktionen:

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

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

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

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

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:

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

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

Simultane Drehimpuls-Eigenzustände  $\vec{L}_1, \vec{L}_3$

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

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

$$l \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}; \quad \hat{L}^2 \text{ EWe: } \hbar^2 l(l+1) \quad (4)$$

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

Schrödinger-Gl.

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

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

Zeitentwicklung der Wellenfunktion

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

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

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

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

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

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

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

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

Dann:

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

$\Rightarrow$  Energieeigenzustände = stationäre Zustände

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

$$\psi_E = \langle \psi_E | \psi(0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_E^*(\vec{x}) \psi_0(\vec{x}) \quad (5)$$

Bsp.: Freie Teilchen

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

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

Bsp.: harmonischer Oszil:

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

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:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad ; \quad \text{simultane Efn. von } \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$$

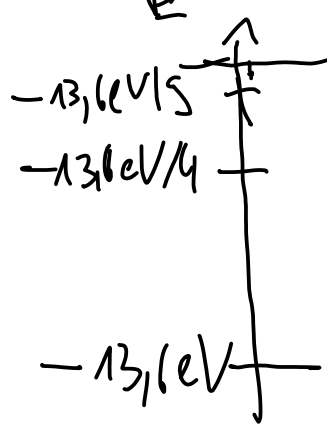
$$\psi_{Elm}(\vec{x}) = R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{H} \psi_{Elm} = E_n \psi_{Elm}; \quad E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2 n^2} \approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$$\text{Bohr-Radius: } a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}; \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

6

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



Spektrallinien

$$\hbar\omega = E_{n_1} - E_{n_2} = -13.6 \text{ eV} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

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

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

Unschärfe-Relation

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle | ; [x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

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