



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

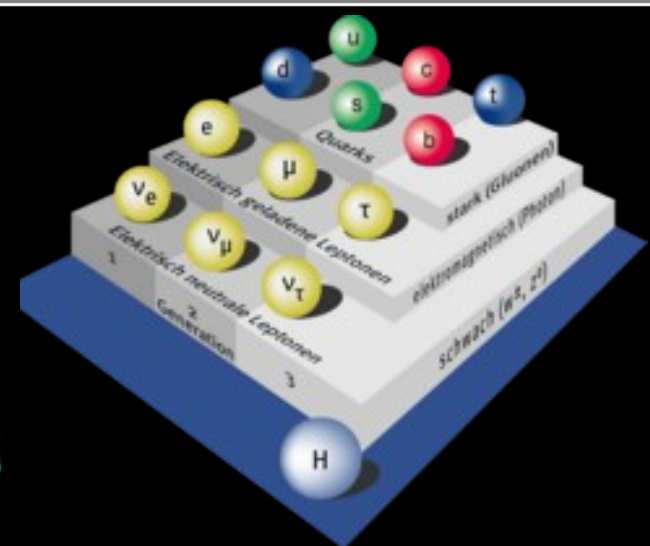
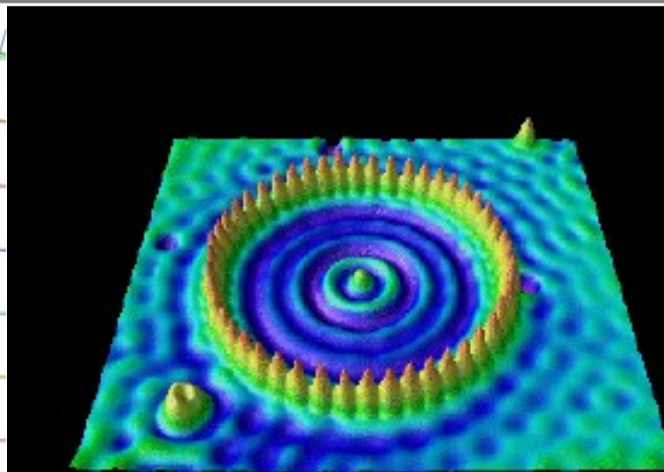
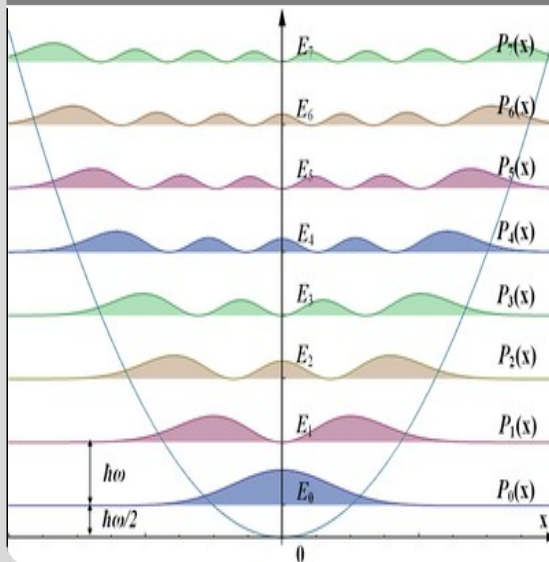
Vorlesung **Moderne Physik (L)**

Die Schrödingergleichung

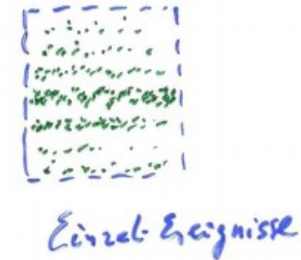
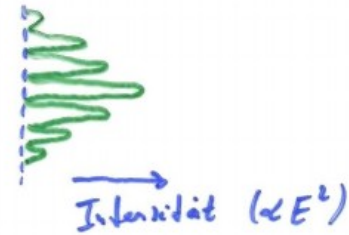
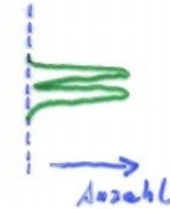
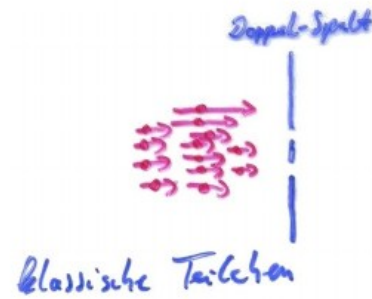
Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



- Doppelspaltexperimente mit Quanten



- Welleneigenschaften von Teilchen (deBroglie-Welle, Materie-Welle):

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

$$E = \hbar \omega$$

- Behandlung von Photonen und Materie-Teilchen ähnlich: für Quanten kann nur eine Wahrscheinlichkeit angegeben werden, sie an einem bestimmten Ort zu beobachten:
 - Photon: $P \propto |\text{elektrische Feldstärke } (\vec{r})|^2 (\propto I)$
 - massebehaftetes Teilchen: $P \propto |\text{Amplitude der deBroglie-Welle } (\vec{r})|^2$
- Teilchen im „Potentialkasten“: Wellenfunktion hat Knoten an den Rändern (in einer Dimension):

$$n \cdot \frac{\lambda}{2} = L \Rightarrow E_n = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Wahrscheinlichkeit für den Aufenthaltsort eines Teilchen gegeben durch: $P(x; x + dx) = |\Psi(x, t)|^2 \cdot dx$

– $|\Psi(x, t)|^2$: „Wahrscheinlichkeitsdichte“

Die Wellenfunktion ist komplexwertig !

- Lokalisierte Teilchen durch Bildung von Wellenpaketen:

$$\Psi(x, t) = \int dk A(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

- Heisenberg'sche Unschärferelation:

$$\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta t \cdot \Delta E &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

- Geschwindigkeit eines Wellenpakets:

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} = v_{\text{Teilchen}}$$

Gruppengeschwindigkeit

– Phasengeschwindigkeit = $\frac{v_{\text{Teilchen}}}{2}$!

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) **Die Schrödingergleichung**
- 6) Anwendungen der Schrödingergleichung
- 7) Das Wasserstoff-Atom
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

Bisher anschauliche Argumentation mit dem Konzept der Materiewellen

Zur quantitativen Behandlung benötigen wir eine **Wellengleichung**, die die Eigenschaften von $\psi(x,t)$ genau festlegt.

Eine solche Gleichung kann nicht hergeleitet, sondern nur postuliert werden.

Einige Gesichtspunkte:

- Wellenzahl und Kreisfrequenz der Welle: $k = p/\hbar$ und $\omega = E/\hbar$
- Dispersionsrelation gegeben durch die klassische Energie-Impulsbeziehung, für Teilchen im Potential setzen wir $E = \frac{p^2}{2m} + V$
- Ebene Wellen, $\Psi(x,t) = A \exp(i(kx - \omega t))$ sollen Lösungen sein
- Wenn nur eine erste Ableitung nach der Zeit auftritt, hat das den Vorteil, dass die zeitliche Entwicklung bei bekanntem Anfangszustand berechnet werden kann.
- $\psi(x,t)$ ist eine stetige, komplexwertige Funktion

Im Jahr 1926 hat Erwin Schrödinger eine solche Gleichung vorgeschlagen:

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



Erwin Schrödinger

Im Jahr 1926 hat Erwin Schrödinger eine solche Gleichung vorgeschlagen:

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

(in drei Raumdimensionen: $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \vec{\nabla}^2$)



Erwin Schrödinger

Im Jahr 1926 hat Erwin Schrödinger eine solche Gleichung vorgeschlagen:

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

(in drei Raumdimensionen: $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \vec{\nabla}^2$)

Man schreibt sie auch oft kompakter als Operator-Gleichung

$$\hat{\mathbf{H}} \Psi(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

mit dem „**Hamilton-Operator**“ $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$



Erwin Schrödinger

Im Jahr 1926 hat Erwin Schrödinger eine solche Gleichung vorgeschlagen:

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

(in drei Raumdimensionen: $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \vec{\nabla}^2$)



Erwin Schrödinger

Man schreibt sie auch oft kompakter als Operator-Gleichung

$$\hat{\mathbf{H}} \Psi(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

mit dem „**Hamilton-Operator**“ $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$

Den Differentialoperator $\hat{\mathbf{p}} = -i \hbar \vec{\nabla}$

mit $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$ nennt man den **Impulsoperator**

Im Jahr 1926 hat Erwin Schrödinger eine solche Gleichung vorgeschlagen:

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

(in drei Raumdimensionen: $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \vec{\nabla}^2$)



Erwin Schrödinger

Man schreibt sie auch oft kompakter als Operator-Gleichung

$$\hat{\mathbf{H}} \Psi(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

mit dem „**Hamilton-Operator**“ $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$

Den Differentialoperator $\hat{\mathbf{p}} = -i \hbar \vec{\nabla}$

mit $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$ nennt man den **Impulsoperator**

So geschrieben, sieht die Schrödingergleichung fast klassisch aus:

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

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t)$$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

mit $\hbar k = p$ und $\hbar \omega = E$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

$$\text{mit } \hbar k = p \text{ und } \hbar \omega = E \quad \Rightarrow \quad \frac{p^2}{2m} = E$$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

$$\text{mit } \hbar k = p \text{ und } \hbar \omega = E \quad \Rightarrow \quad \frac{p^2}{2m} = E \quad \checkmark$$

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

$$\text{mit } \hbar k = p \text{ und } \hbar \omega = E \quad \Rightarrow \quad \frac{p^2}{2m} = E \quad \checkmark$$

Ebene Welle ist Lösung der Schrödingergleichung

Ebene Welle: $\Psi(\vec{x}, t) = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t))$

1. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla} \Psi(x, t) = i\vec{k} \Psi(x, t)$

2. räumliche Ableitung: $\vec{\nabla}^2 \Psi(x, t) = \vec{\nabla} \cdot (i\vec{k} \Psi(x, t)) = i^2 \vec{k}^2 \Psi(x, t)$

1. zeitliche Ableitung: $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t)$

Einsetzen in S-Gleichung für $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} i^2 k^2 \Psi(x, t) = -i^2 \hbar \omega \Psi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

$$\text{mit } \hbar k = p \text{ und } \hbar \omega = E \quad \Rightarrow \quad \frac{p^2}{2m} = E \quad \checkmark$$

Ebene Welle ist Lösung der Schrödingergleichung

Wie sieht es mit einem Wellenpaket aus ? $\rightarrow$ Übungsaufgabe !

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$$-i\hbar\vec{\nabla}A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) = -i^2\hbar\vec{k}\Psi(x, t)$$

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{\nabla} A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) &= -i^2\hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \hbar\vec{k}\Psi(x, t) \end{aligned}$$

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{\nabla} A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) &= -i^2\hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \vec{p}\Psi(x, t) \end{aligned}$$

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{\nabla} A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) &= -i^2\hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \vec{p}\Psi(x, t) \end{aligned}$$

Interessant ! $\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = \vec{p}\Psi(x, t)$

$\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(x, t)$ angewandt auf ebene Welle:

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{\nabla} A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) &= -i^2\hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \hbar\vec{k}\Psi(x, t) \\ &= \vec{p}\Psi(x, t) \end{aligned}$$

Interessant ! $\hat{\mathbf{p}}\Psi(x, t) = \vec{p}\Psi(x, t)$

Man sagt: Der Impuls ist ein Eigenwert des Impulsoperators

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**,
die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{\mathbf{E}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{\mathbf{E}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- Impuls: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- Impuls: $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$
- Ort: $\hat{x} = \vec{x}$

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- Impuls: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$
- Ort: $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$
- Drehimpuls: $\hat{\mathbf{L}} = \vec{x} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- Impuls: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$
- Ort: $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$
- Drehimpuls: $\hat{\mathbf{L}} = \vec{x} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$

→ **Fundamental neue Weltsicht der Quantenphysik**

- Vektoren und reellen Zahlen der klassischen Physik entsprechen Operatoren (Ableitungsvorschriften)
- Reihenfolge der Anwendung spielt eine Rolle
- **Ehrenfest-Theorem**: klassische Bewegungsgleichungen gelten für Erwartungswerte, wenn Wellenfunktion genügend lokalisiert ist.
- historisch: **Bohr'sches Korrespondenzprinzip**: für große Quantenzahlen (viele Teilchen, hohe Anregungsenergie) → Übergang zur klassischen Physik

Klassischen Größen entsprechen in der Quantenphysik **Operatoren**, die auf $\psi(x,t)$ angewendet werden, z. B:

- Energie: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x)$ und $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- Impuls: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$
- Ort: $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$
- Drehimpuls: $\hat{\mathbf{L}} = \vec{x} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$

→ **Fundamental neue Weltsicht der Quantenphysik**

- Vektoren und reellen Zahlen der klassischen Physik entsprechen Operatoren (Ableitungsvorschriften)
- Reihenfolge der Anwendung spielt eine Rolle
- **Ehrenfest-Theorem**: klassische Bewegungsgleichungen gelten für Erwartungswerte, wenn Wellenfunktion genügend lokalisiert ist.
- historisch: **Bohr'sches Korrespondenzprinzip**: für große Quantenzahlen (viele Teilchen, hohe Anregungsenergie) → Übergang zur klassischen Physik

Wir werden diese neue Welt in den folgenden Vorlesungen erkunden !

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{x} = \vec{x}$:

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$:

Erwartungswert $\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$

Definition des Erwartungswerts
einer Zufallsgröße bzgl. einer
Verteilung

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$:

$$\begin{aligned}\text{Erwartungswert } \langle x(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^* \Psi dx\end{aligned}$$

Definition des Erwartungswerts
einer Zufallsgröße bzgl. einer
Verteilung

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{x} = \vec{x}$:

Erwartungswert $\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$

Definition des Erwartungswerts
einer Zufallsgröße bzgl. einer
Verteilung

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$:

Erwartungswert $\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$

Definition des Erwartungswerts
einer Zufallsgröße bzgl. einer
Verteilung

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{\mathbf{x}} \Psi dx$$

Physikalische Messgrößen sind „Erwartungswerte“ (Mittelwerte)
der durch die Wellenfunktion bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel Ortsoperator $\hat{\mathbf{x}} = \vec{x}$:

Erwartungswert $\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$

Definition des Erwartungswerts
einer Zufallsgröße bzgl. einer
Verteilung

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{\mathbf{x}} \Psi dx$$

$$:= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle$$

kompakte Schreibweise

Beispiel 2: Impuls p

Beispiel 2: Impuls p

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx$$

Beispiel 2: Impuls p

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx\end{aligned}$$

Beispiel 2: Impuls p

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx\end{aligned}$$

Beispiel 2: Impuls p

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx$$

Mit Ergebnis von vorhin, $\hat{p}\Psi = p \Psi$

Beispiel 2: Impuls p

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx$$

Mit Ergebnis von vorhin, $\hat{p}\Psi = p \Psi$

$$= \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle$$

Der gleiche Zusammenhang wie eben für x !

Beispiel 2: Impuls p

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx$$

Mit Ergebnis von vorhin, $\hat{p}\Psi = p \Psi$

$$= \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle$$

Der gleiche Zusammenhang wie eben für x !

Der anhand dieser beiden Beispiele illustrierte Zusammenhang gilt allgemein:

Beispiel 2: Impuls p

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Psi|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \Psi^* \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx \quad \text{Mit Ergebnis von vorhin, } \hat{p} \Psi = p \Psi$$

$$= \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle \quad \text{Der gleiche Zusammenhang wie eben für } x !$$

Der anhand dieser beiden Beispiele illustrierte Zusammenhang gilt allgemein:

Der Erwartungswert einer Observablen o ist gegeben durch:

$$\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle$$

Die Wellenfunktionen Ψ sind Elemente eines Vektorraumes

$$\int \Psi^* \Psi dx := \langle \Psi | \Psi \rangle \quad \text{ist das Skalarprodukt in diesem Vektorraum}$$

$$\langle \Psi | \quad := \text{„bra“-Vektor}$$

$$| \Psi \rangle \quad := \text{„ket“-Vektor}$$

Entspricht $\vec{x}^T$ und $\vec{x}$ sowie $\vec{x} \cdot \vec{x} = \vec{x}^T \vec{x}$
bei Vektoren im Ortsraum

Der Erwartungswert einer Observablen o ergibt sich als „Sandwich“ des entsprechenden Operators mit einem bra- und einem ket-Zustand: $\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle$

Fall $\hat{o}\Psi = o\psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Fall $\hat{O}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

Fall $\hat{o}\Psi = o\psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$(\Delta o)^2 = Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2$$

Definition der Varianz
aus der Statistik

Fall $\hat{o}\Psi = o\psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\ &= \langle \Psi | \hat{o}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{o}\Psi = o\psi\end{aligned}$$

Fall $\hat{O}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\&= \langle \Psi | \hat{O}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{O}\Psi = o\Psi \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2\end{aligned}$$

Fall $\hat{O}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\&= \langle \Psi | \hat{O}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{O}\Psi = o\Psi \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2\end{aligned}$$

Fall $\hat{O}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\&= \langle \Psi | \hat{O}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{O}\Psi = o\Psi \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o^2 \langle \Psi | \Psi \rangle - o^2\end{aligned}$$

Fall $\hat{O}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\&= \langle \Psi | \hat{O}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{O}\Psi = o\Psi \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o^2 \langle \Psi | \Psi \rangle - o^2 \\&= o^2 - o^2 = 0\end{aligned}$$

Fall $\hat{o}\Psi = o\Psi$ gilt, d.h. wenn Ψ eine Eigenfunktion des Operators zum Eigenwert o ist, dann ist dieser Wert genau bestimmt, d.h. er hat keine Unschärfe

Unbestimmtheit (Varianz) von $Var[o]$:

$$\begin{aligned}(\Delta o)^2 &= Var[o] = \langle o^2 \rangle - \langle o \rangle^2 && \text{Definition der Varianz aus der Statistik} \\&= \langle \Psi | \hat{o}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle^2 && \text{wegen } \hat{o}\Psi = o\Psi \\&= o \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o \langle \Psi | \hat{o} | \Psi \rangle - o^2 \\&= o^2 \langle \Psi | \Psi \rangle - o^2 \\&= o^2 - o^2 = 0\end{aligned}$$

Eigenwerte entsprechen Messgrößen ohne Unsicherheit !

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

$$\text{Var}[x] = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\text{Var}[x] = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2\end{aligned}$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2\end{aligned}$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2 \\ &= \int x^2 |\Psi|^2 dx - \left(\int x |\Psi|^2 dx \right)^2\end{aligned}$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2 \\ &= \int x^2 |\Psi|^2 dx - \left(\int x |\Psi|^2 dx \right)^2 \neq 0\end{aligned}$$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2 \\ &= \int x^2 |\Psi|^2 dx - \left(\int x |\Psi|^2 dx \right)^2 \neq 0\end{aligned}$$

Varianz der durch $|\Psi|^2$ gegebenen Ortsverteilung

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2 \\ &= \int x^2 |\Psi|^2 dx - \left(\int x |\Psi|^2 dx \right)^2 \neq 0\end{aligned}$$

Varianz der durch $|\Psi|^2$ gegebenen Ortsverteilung

Man kann zeigen, dass zwei Observable nur dann gleichzeitig genau bestimmt werden können, wenn ihr Operatoren „kommutieren“, wenn also gilt $\hat{o}_1 \hat{o}_2 = \hat{o}_2 \hat{o}_1$

Im Allgemeinen verschwindet die Unschärfe nicht !

Beispiel Ort x :

$$\begin{aligned}\text{Var}[x] &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbf{x}} | \Psi \rangle^2 \\ &= \int \Psi^* x^2 \Psi \, dx - \left(\int \Psi^* x \Psi \, dx \right)^2 \\ &= \int x^2 |\Psi|^2 dx - \left(\int x |\Psi|^2 dx \right)^2 \neq 0\end{aligned}$$

Varianz der durch $|\Psi|^2$ gegebenen Ortsverteilung

Man kann zeigen, dass zwei Observable nur dann gleichzeitig genau bestimmt werden können, wenn ihr Operatoren „kommutieren“, wenn also gilt $\hat{O}_1 \hat{O}_2 = \hat{O}_2 \hat{O}_1$

Orts- und Impulsoperator kommutieren nicht:

$$\hat{p}\hat{x}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x\Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} + 1 \right) \Psi \quad \neq \quad \hat{x}\hat{p}\Psi = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi$$

Man definiert den Kommutator von zwei Operatoren als $\hat{o}_1\hat{o}_2 - \hat{o}_2\hat{o}_1 =: [\hat{o}_1, \hat{o}_2]$

Man definiert den Kommutator von zwei Operatoren als $\hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1 =: [\hat{O}_1, \hat{O}_2]$

Die Unschärferelation kann mit Hilfe des Kommutators allgemein geschrieben werden

$$\Delta o_1 \Delta o_2 \geq \frac{1}{2} \langle \Psi | [\hat{O}_1, \hat{O}_2] | \Psi \rangle$$

mit $\Delta o = \sigma_o$ ist die Standardabweichung der Verteilung von o gemeint

Man definiert den Kommutator von zwei Operatoren als $\hat{o}_1 \hat{o}_2 - \hat{o}_2 \hat{o}_1 =: [\hat{o}_1, \hat{o}_2]$

Die Unschärferelation kann mit Hilfe des Kommutators allgemein geschrieben werden

$$\Delta o_1 \Delta o_2 \geq \frac{1}{2} \langle \Psi | [\hat{o}_1, \hat{o}_2] | \Psi \rangle \quad \text{mit } \Delta o = \sigma_o \text{ ist die Standardabweichung der Verteilung von } o \text{ gemeint}$$

Ansatz für den Beweis:

$$\Delta o_1^2 = \langle \Psi | \hat{o}_1^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{o}_1 | \Psi \rangle^2$$

$$\Delta o_2^2 = \langle \Psi | \hat{o}_2^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{o}_2 | \Psi \rangle^2$$

Dann folgt ganz viel Schreibaarbeit zum Ausmultiplizieren
und die Anwendung der Cauchy-Schwarz'schen Ungleichung ...

Pause

und Zeit für Fragen ?

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) **Anwendungen der Schrödingergleichung**
- 7) Das Wasserstoff-Atom
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t)$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t)$$



$$-\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{array}{ccc} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \downarrow \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \qquad \qquad \qquad i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \end{array}$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{array}{ccc} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) & & \\ \downarrow & & \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) & & i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \\ & & \downarrow \\ & & -i^2 \hbar \omega \psi(x) \exp(-i\omega t) \end{array}$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) &= i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \downarrow & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) & \qquad \qquad \qquad i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad -i^2 \hbar \omega \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) &= \hbar \omega \psi(x) \end{aligned}$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) &= i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \downarrow & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) & \qquad \qquad \qquad i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad -i^2 \hbar \omega \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) &= \hbar \omega \psi(x) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad E \psi(x) \end{aligned}$$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) &= i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \downarrow & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) & \qquad \qquad \qquad i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad -i^2 \hbar \omega \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) &= \hbar \omega \psi(x) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad E \psi(x) \end{aligned}$$

Stationäre Schrödingergleichung: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$

Wenn Potentiale vorhanden sind, arbeitet man mit einem Produktansatz, um die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

Einsetzen des Ansatzes in die S-Gleichung (1-dim.):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \exp(-i\omega t) + V(x) \psi(x) \exp(-i\omega t) &= i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \downarrow & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ -\exp(-i\omega t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) & \qquad \qquad \qquad i \hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i\omega t) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad -i^2 \hbar \omega \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) &= \hbar \omega \psi(x) \\ & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \qquad \qquad \qquad E \psi(x) \end{aligned}$$

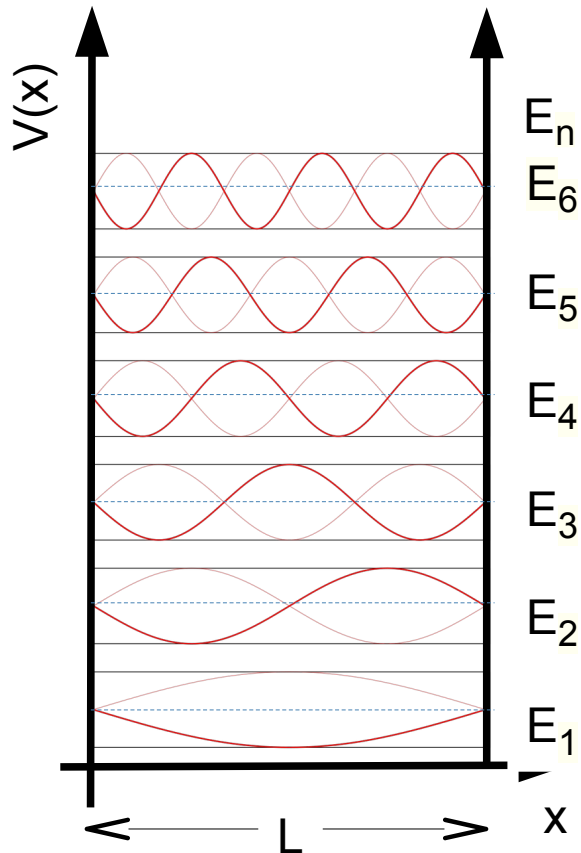
Stationäre Schrödingergleichung: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$

Oder $\hat{\mathbf{H}}\psi(x) = E\psi(x)$ E ist Eigenwert des Hamilton-Operators

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 86

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$

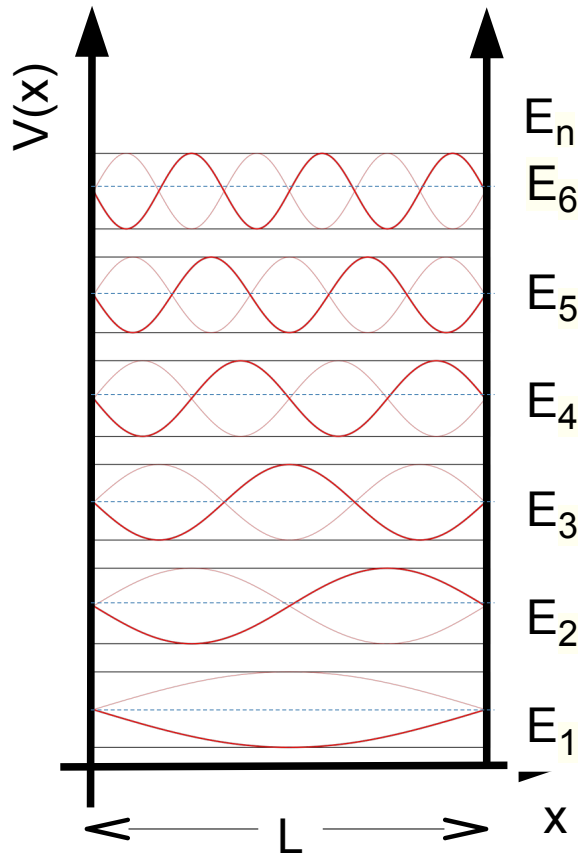


6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 87

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

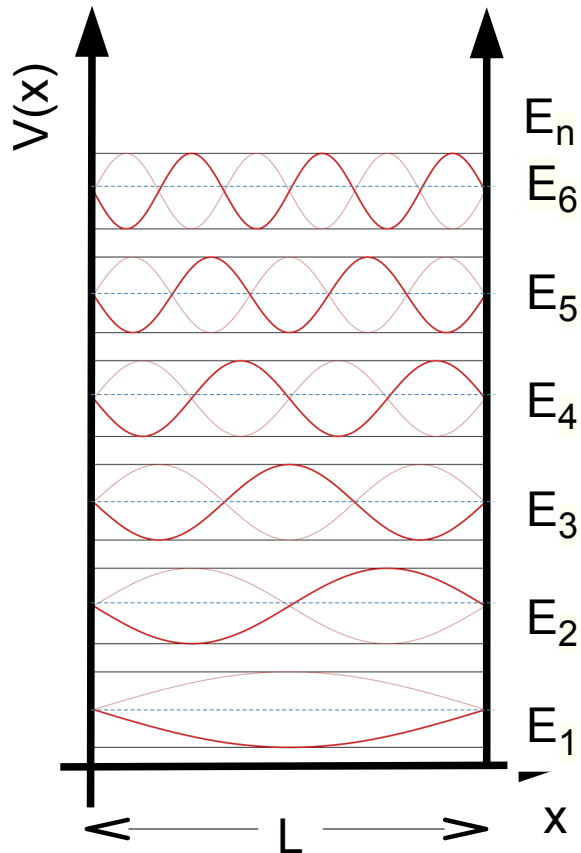
$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 88

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



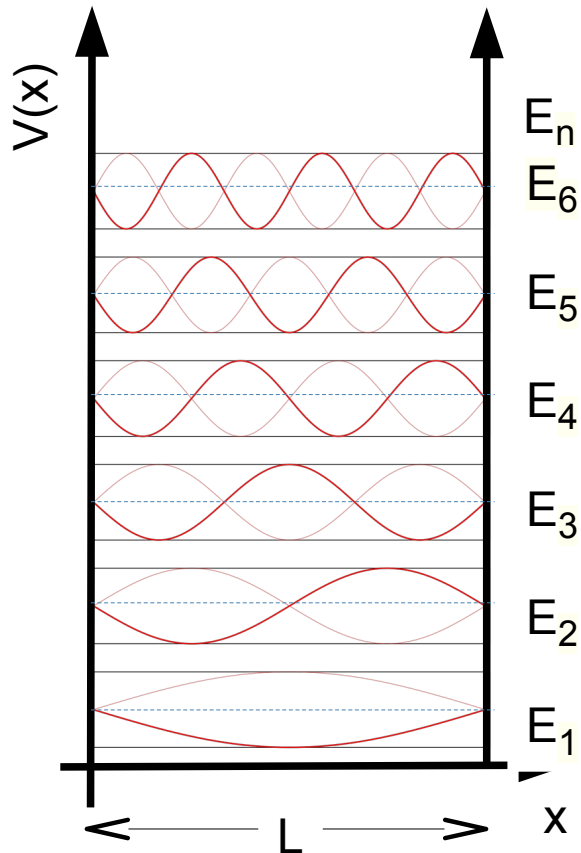
Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 89

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

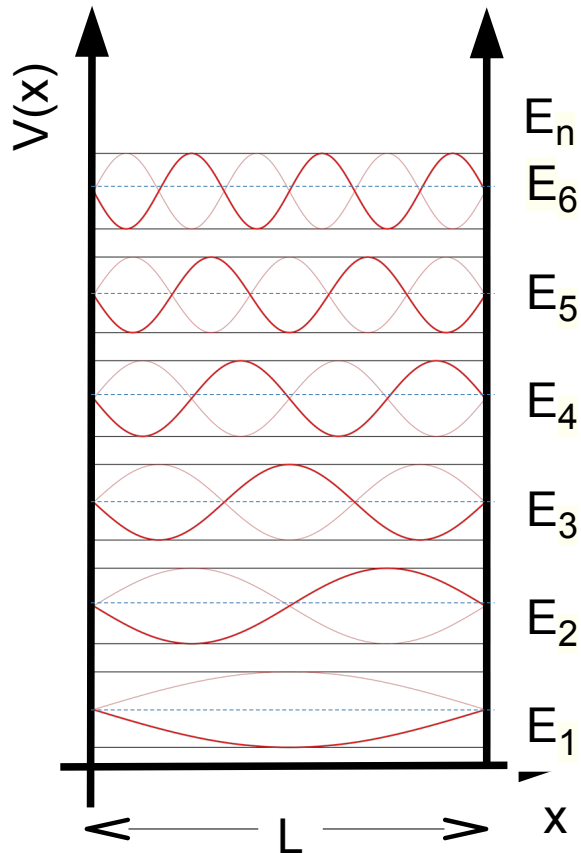
$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 90

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

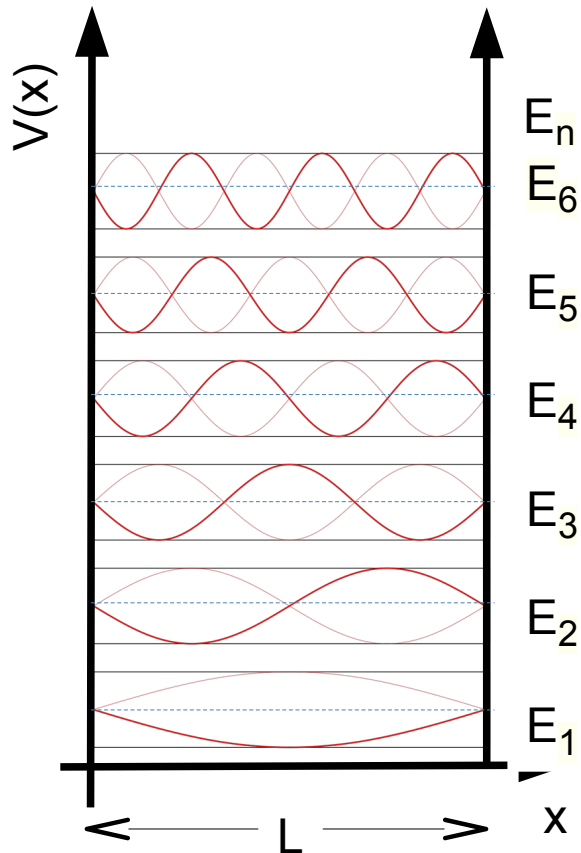
A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x = 0) = 0$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 91

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

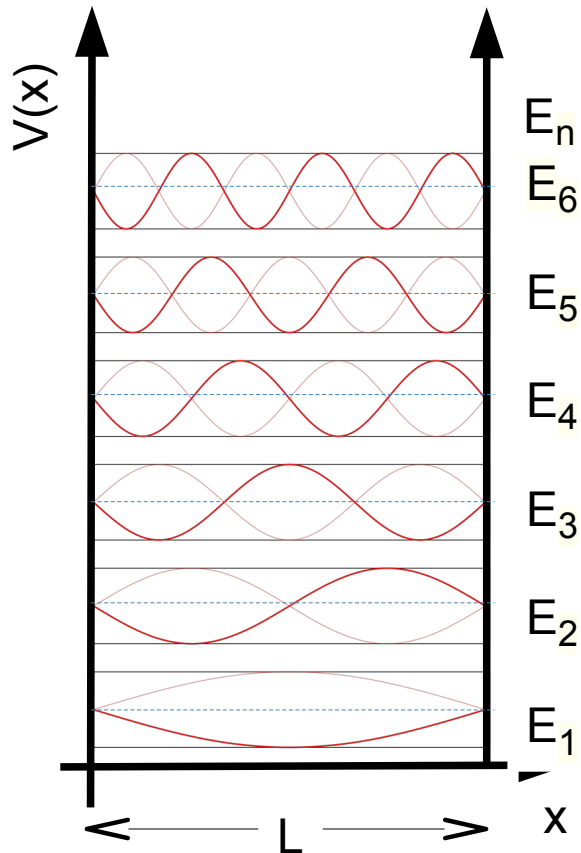
A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x = 0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 92

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten** (mit unendlich hohen Wänden)

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

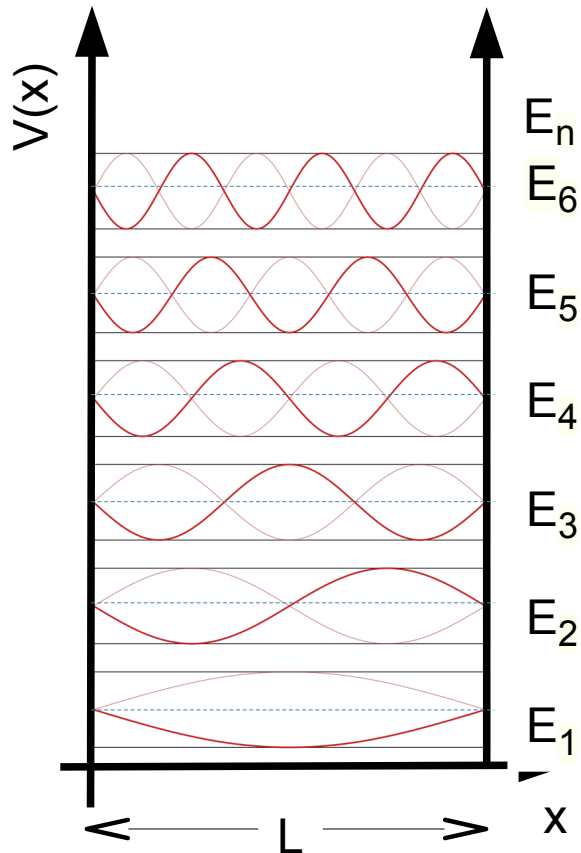
$$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x=L) = 0$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 93

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

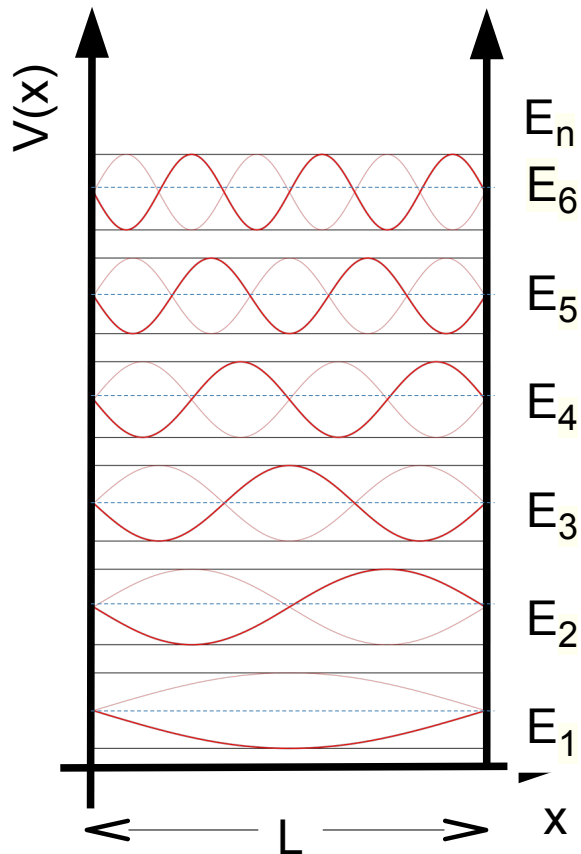
$$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x=L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 94

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x=L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

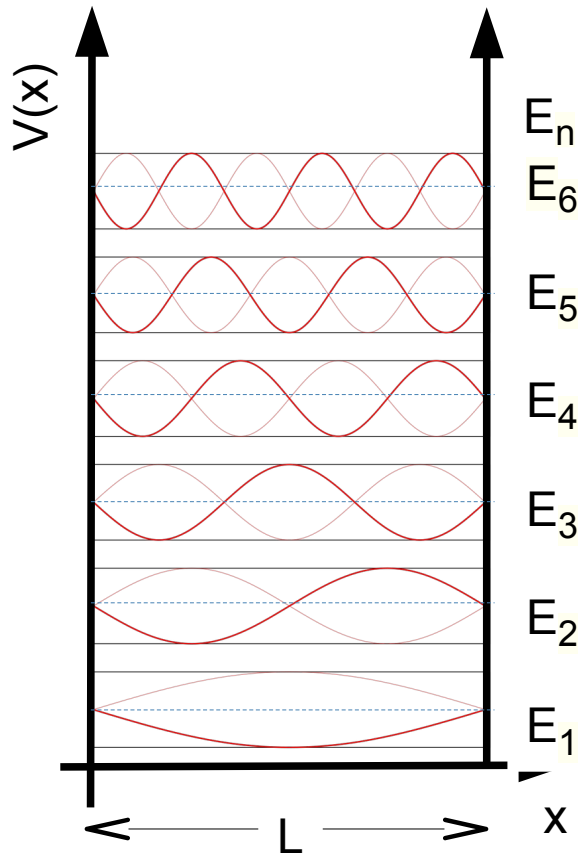
↓

$$2iA \sin kL = 0$$

6.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden 95

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$
$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x = 0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x = L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

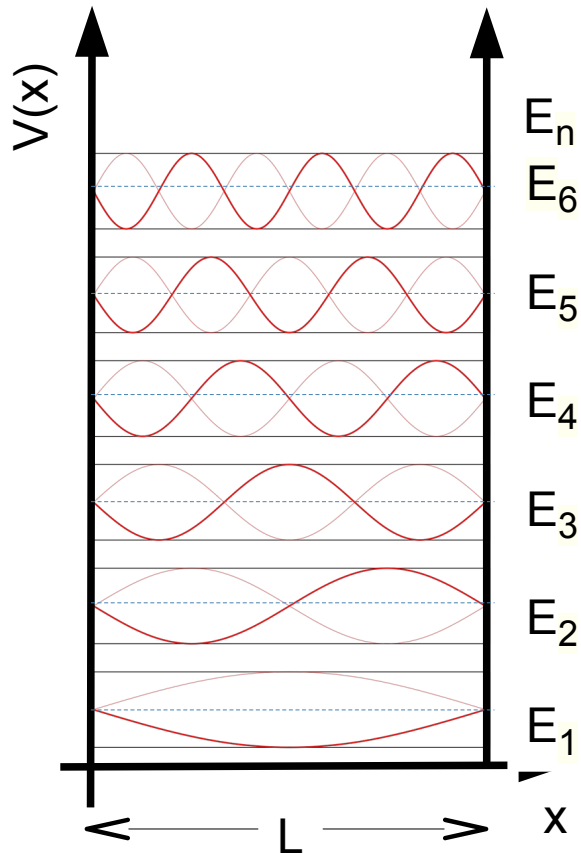
$$2iA \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n\pi, n = 1, \dots, \infty$$

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$

$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x=L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

$$2iA \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n\pi, n = 1, \dots, \infty$$

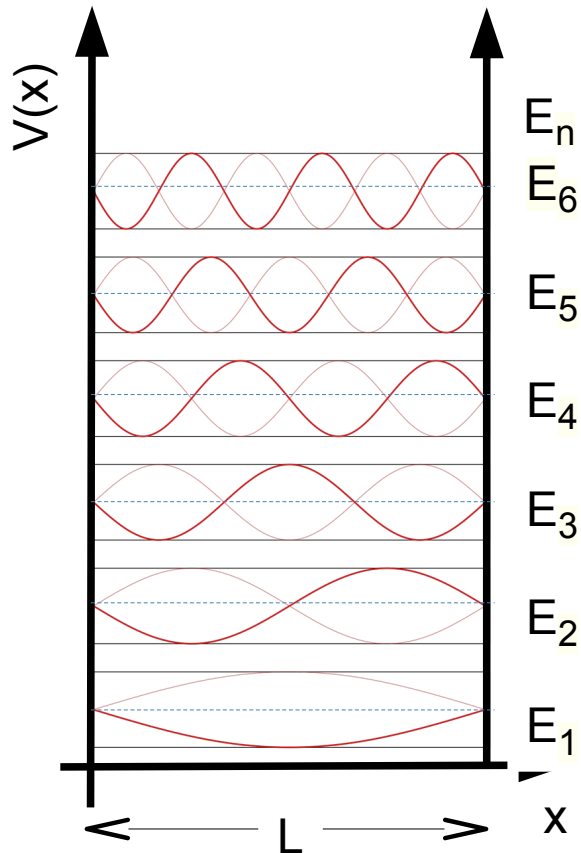
oder

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, n = 1, \dots, \infty$$

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$

$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x=L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

$$2iA \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n\pi, n = 1, \dots, \infty$$

oder

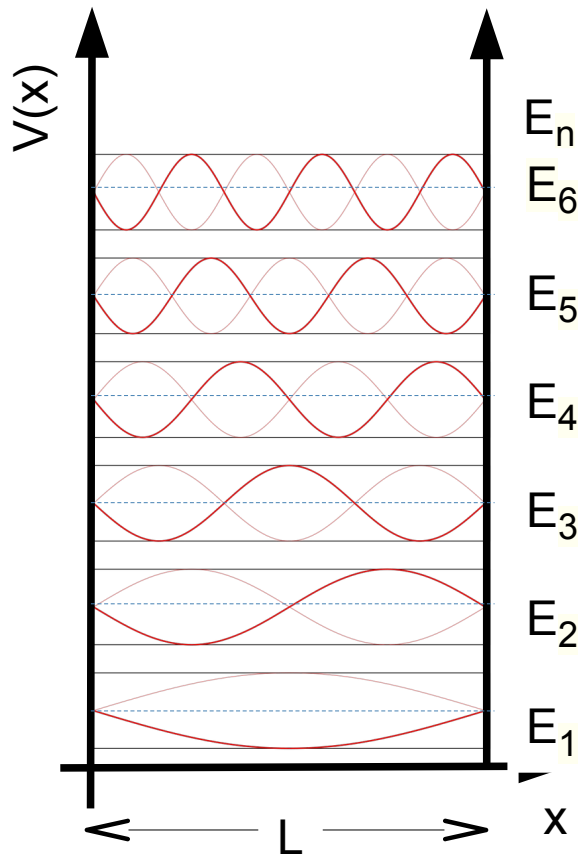
$$k_n = \frac{n\pi}{L}, n = 1, \dots, \infty$$

Diskrete Impulswerte: $p_n = \hbar k_n$

Als **erstes Beispiel** wenden wir die stationäre Schrödingergleichung auf ein Problem an, das wir schon kennen: **Teilchen im Potentialkasten (mit unendlich hohen Wänden)**

$$V(x) = \infty, x < 0 \text{ und } x > L$$

$$V(x) = 0, 0 \leq x \leq L$$



Wie schon früher, lösen wir die Differentialgleichung zweiter Ordnung durch einen Ansatz:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$$

A und B werden durch Einsetzen aus den Randbedingungen bestimmt:

$$\psi(x = 0) = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\psi(x = L) = 0 \Rightarrow A (\exp(ikL) - \exp(-ikL)) = 0$$

$$\downarrow$$

$$2iA \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n\pi, n = 1, \dots, \infty$$

oder

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, n = 1, \dots, \infty$$

Diskrete Impulswerte: $p_n = \hbar k_n$

Diskrete Energien: $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Zugehörige Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$

Zugehörige Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$

Normierungsbedingung: $\int \psi^* \psi dx = 1$

Zugehörige Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$

Normierungsbedingung: $\int \psi^* \psi dx = 1$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, n = 1, \dots$$

Zugehörige Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$

Normierungsbedingung: $\int \psi^* \psi dx = 1$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, n = 1, \dots$$

Anwendung der Schrödingergleichung liefert die gleichen Ergebnisse wie schon unsere früheren Überlegungen !

Zugehörige Wellenfunktionen: $\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$

Normierungsbedingung: $\int \psi^* \psi dx = 1$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, n = 1, \dots$$

Anwendung der Schrödingergleichung liefert die gleichen Ergebnisse wie schon unsere früheren Überlegungen !

Anmerkungen: die Wellenfunktionen $\Psi_n(x)$ sind hier reell,

die vollständigen Wellenfunktionen $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \cdot \exp(-i\omega t)$ sind aber komplexwertig;

$\psi'_n(x) = \psi_n(x) \cdot \exp(i\varphi)$ wären natürlich auch gültige Lösungen

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Lösung durch Separation der Variablen, führt zu drei Differentialgleichungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, wie wir sie eben in einer Dimension hatten

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Lösung durch Separation der Variablen, führt zu drei Differentialgleichungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, wie wir sie eben in einer Dimension hatten

Lösung: $\psi(\vec{x}) = A \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z)$ mit

$$k_x = \frac{n_x \pi}{l_x}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{l_y}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{l_z}$$

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Lösung durch Separation der Variablen, führt zu drei Differentialgleichungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, wie wir sie eben in einer Dimension hatten

Lösung: $\psi(\vec{x}) = A \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z)$ mit

$$k_x = \frac{n_x \pi}{l_x}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{l_y}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{l_z}$$

Eine Quantenzahl pro Raumdimension !

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Lösung durch Separation der Variablen, führt zu drei Differentialgleichungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, wie wir sie eben in einer Dimension hatten

Lösung: $\psi(\vec{x}) = A \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z)$ mit

$$k_x = \frac{n_x \pi}{l_x}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{l_y}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{l_z}$$

Eine Quantenzahl pro Raumdimension !

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} \quad E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right)$$

6.3 Potentialtopf 3d mit unendlich hohen Wänden 11

Quantenteilchen im dreidimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } (0 \leq x \leq L_x) \wedge (0 \leq y \leq L_y) \wedge (0 \leq z \leq L_z) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

stationäre Schrödingergleichung im Kasten: $-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$

Produktansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z)$

Lösung durch Separation der Variablen, führt zu drei Differentialgleichungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, wie wir sie eben in einer Dimension hatten

Lösung: $\psi(\vec{x}) = A \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z)$ mit

$$k_x = \frac{n_x \pi}{l_x}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{l_y}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{l_z}$$

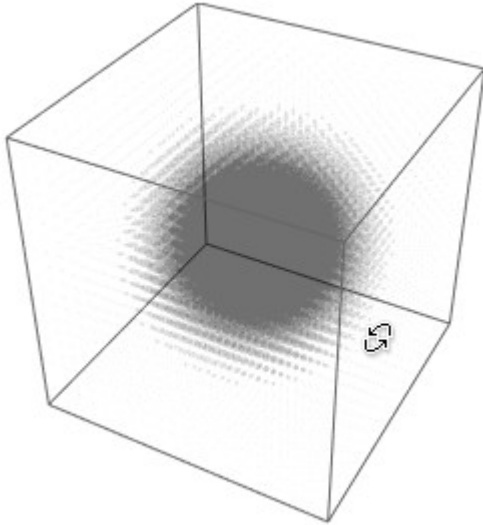
Eine Quantenzahl pro Raumdimension !

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} \quad E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right)$$

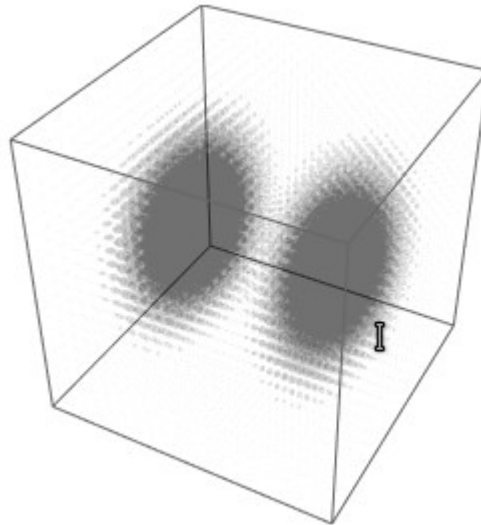
Zustände mit gleicher Energie bei unterschiedlichen Quantenzahlen nennt man „**entartete Zustände**“

Visualisierung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit

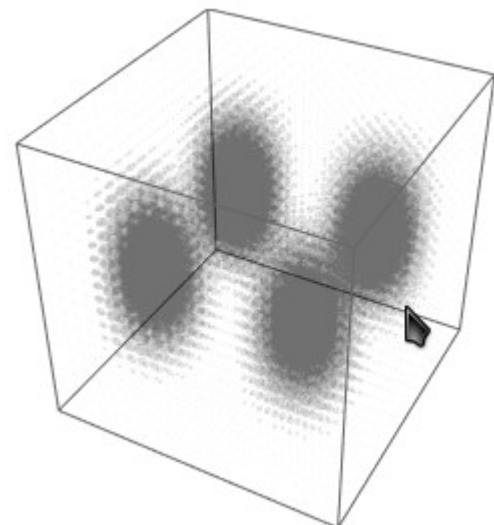
$(1,1,1)$



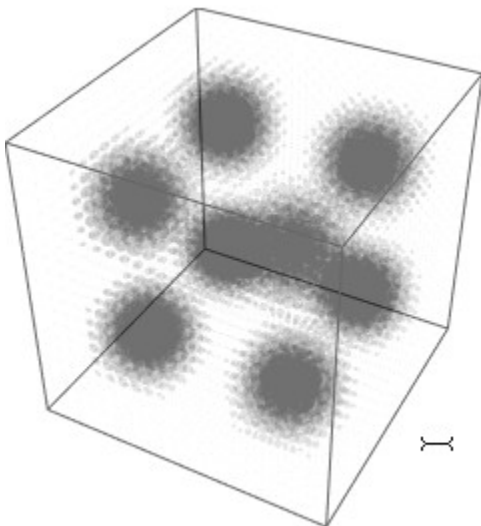
$(2,1,1)$



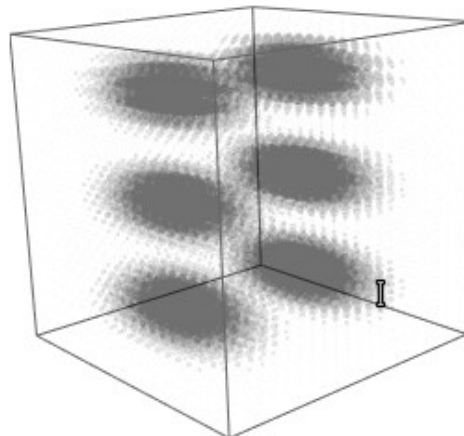
$(2,2,1)$



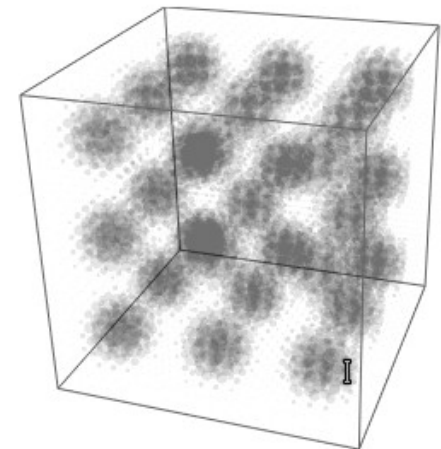
$(2,2,2)$



$(1,2,3)$



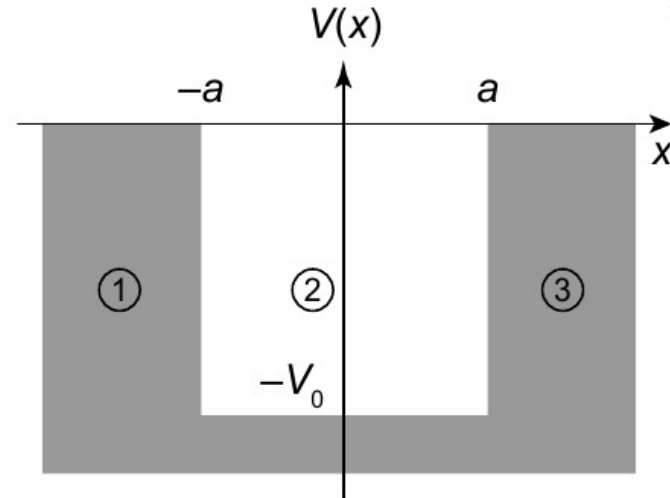
$(3,3,3)$



6.4 realistischer: Potentialtopf mit endlich hohen Wänden¹¹³

Realistischer Potentialtopf:
endlich hohe Wände

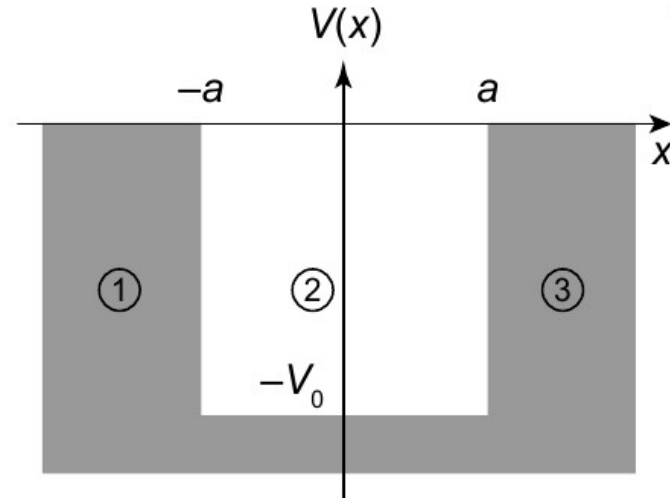
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$



6.4 realistischer: Potentialtopf mit endlich hohen Wänden¹¹⁴

Realistischer Potenzialtopf:
endlich hohe Wände

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$



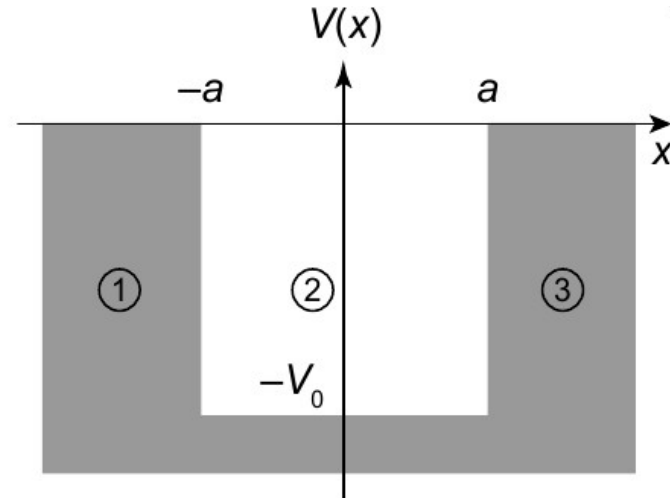
Schrödingergleichung in den Bereichen (1), (2), und (3):

$$(1) \text{ und } (3): -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{mit } E < 0$$

6.4 realistischer: Potentialtopf mit endlich hohen Wänden¹¹⁵

Realistischer Potentialtopf:
endlich hohe Wände

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$



Schrödingergleichung in den Bereichen (1), (2), und (3):

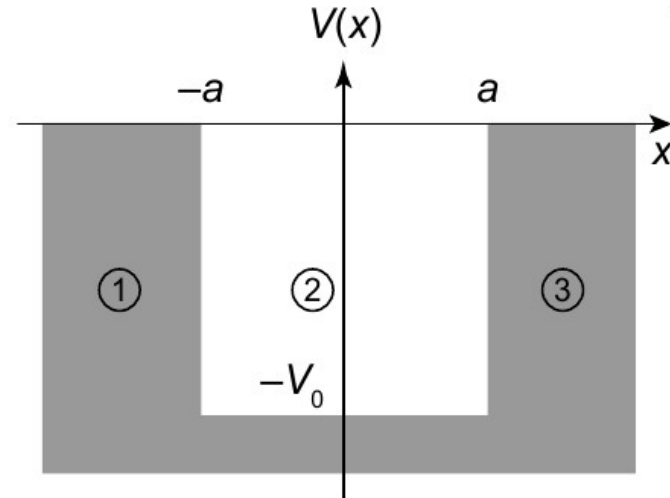
$$(1) \text{ und } (3): -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{mit } E < 0$$

$$(2): -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = (E - (-V_0)) \psi(x) \quad \text{mit } E - (-V_0) > 0$$

6.4 realistischer: Potentialtopf mit endlich hohen Wänden¹¹⁶

Realistischer Potentialtopf:
endlich hohe Wände

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$



Schrödingergleichung in den Bereichen (1), (2), und (3):

$$(1) \text{ und } (3): \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{mit } E < 0$$

$$(2): \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = (E - (-V_0)) \psi(x) \quad \text{mit } E - (-V_0) > 0$$

Abkürzende Schreibweise:

$$(1) \text{ und } (3): \quad \psi'' = \kappa^2 \psi \quad \text{mit } \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$(2): \quad \psi'' = -q^2 \psi \quad \text{mit } q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

Anforderungen an die Wellenfunktion:

1. ψ muss **Schrödingergleichung** lösen: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (bzw. $\hat{H}\psi = E\psi$)

Anforderungen an die Wellenfunktion:

1. ψ muss **Schrödingergleichung lösen**: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (bzw. $\hat{H}\psi = E\psi$)
2. ψ muss in allen Ortskoordinaten **stetig** und **stetig differenzierbar** sein
($\rightarrow$ in einer Dimension: ψ und $\psi' = \partial\psi/\partial x$ stetig)

Anforderungen an die Wellenfunktion:

1. ψ muss **Schrödingergleichung** lösen: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (bzw. $\hat{H}\psi = E\psi$)
2. ψ muss in allen Ortskoordinaten **stetig** und **stetig differenzierbar** sein
($\rightarrow$ in einer Dimension: ψ und $\psi' = \partial\psi/\partial x$ stetig)
3. ψ muss **eindeutig** und **endlich** sein (Wahrscheinlichkeitsinterpretation)

Anforderungen an die Wellenfunktion:

1. ψ muss **Schrödingergleichung** lösen: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (bzw. $\hat{H}\psi = E\psi$)
2. ψ muss in allen Ortskoordinaten **stetig** und **stetig differenzierbar** sein
($\rightarrow$ in einer Dimension: ψ und $\psi' = \partial\psi/\partial x$ stetig)
3. ψ muss **eindeutig** und **endlich** sein (Wahrscheinlichkeitsinterpretation)
4. ψ muss für $x \rightarrow \pm\infty$ „**schnell genug**“ **abfallen**, so dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

(Normierbarkeit, Wahrscheinlichkeitsinterpretation)

Gebiete (1) und (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz:
$$\begin{cases} \psi(x) = C \exp(-\kappa x), x > a \\ \psi(x) = D \exp(\kappa x), x < -a \end{cases}$$

Gebiete (1) und (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz:
$$\begin{cases} \psi(x) = C \exp(-\kappa x), x > a \\ \psi(x) = D \exp(\kappa x), x < -a \end{cases}$$

Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich $|x| > a$ exponentiell gedämpft.

Gebiete (1) und (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz:
$$\begin{cases} \psi(x) = C \exp(-\kappa x), x > a \\ \psi(x) = D \exp(\kappa x), x < -a \end{cases}$$

Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich $|x| > a$ exponentiell gedämpft.

Gebiet (2): $\psi'' = -q^2 \psi$

Ansatz:
$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Gebiete (1) und (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz:
$$\begin{cases} \psi(x) = C \exp(-\kappa x), x > a \\ \psi(x) = D \exp(\kappa x), x < -a \end{cases}$$

Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich $|x| > a$ exponentiell gedämpft.

Gebiet (2): $\psi'' = -q^2 \psi$

Ansatz:
$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Bedingungen zur Bestimmung der Parameter A , B , C und D und der Energie E

Stetigkeit: $\Psi_1(x = -a) = \psi_2(x = -a); \psi_2(x = a) = \psi_3(x = a)$

Stetige Ableitung: $\Psi'_1(x = -a) = \psi'_2(x = -a); \psi'_2(x = a) = \psi'_3(x = a)$

Normierbarkeit:
$$\int \psi^* \psi dx = 1$$

Gebiete (1) und (3): $\psi'' = \kappa^2 \psi$

Ansatz:
$$\begin{cases} \psi(x) = C \exp(-\kappa x), x > a \\ \psi(x) = D \exp(\kappa x), x < -a \end{cases}$$

Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich $|x| > a$ exponentiell gedämpft.

Gebiet (2): $\psi'' = -q^2 \psi$

Ansatz:
$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Bedingungen zur Bestimmung der Parameter A , B , C und D und der Energie E

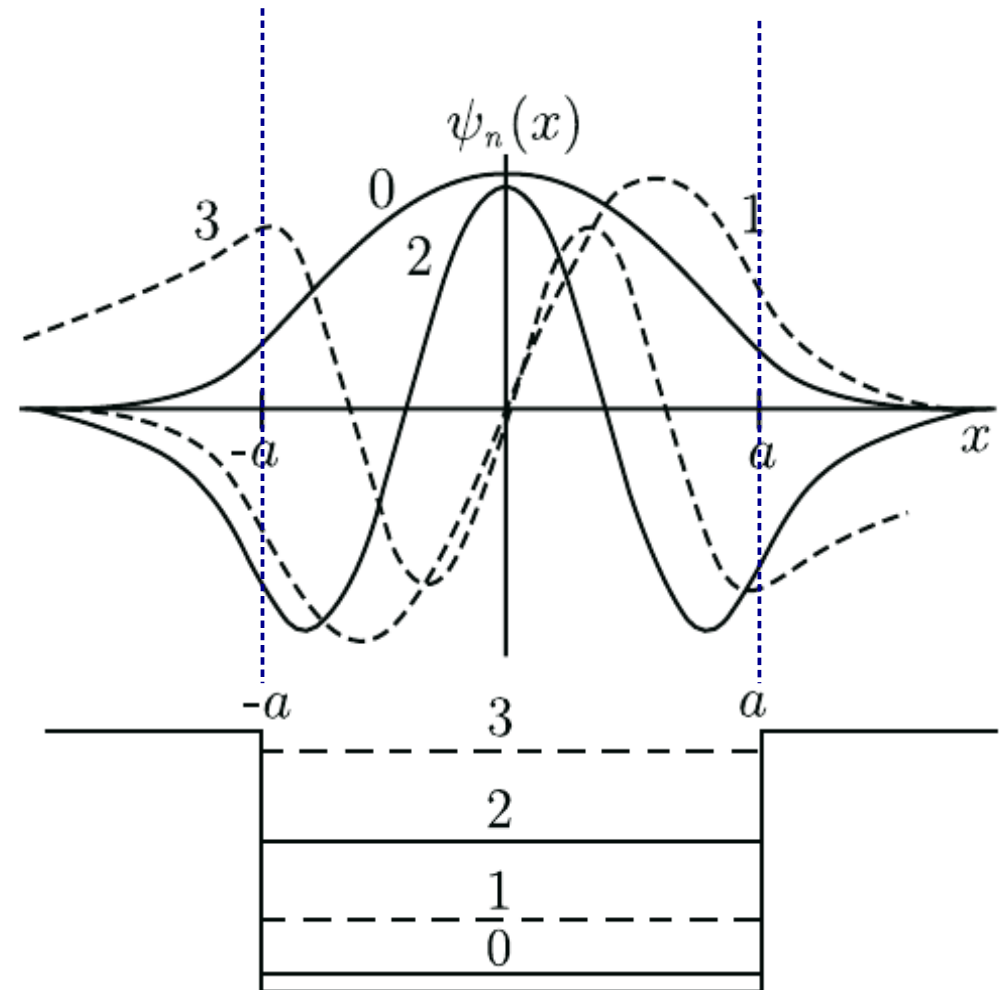
Stetigkeit: $\Psi_1(x = -a) = \psi_2(x = -a); \psi_2(x = a) = \psi_3(x = a)$

Stetige Ableitung: $\Psi'_1(x = -a) = \psi'_2(x = -a); \psi'_2(x = a) = \psi'_3(x = a)$

Normierbarkeit:
$$\int \psi^* \psi dx = 1$$

$\Rightarrow$ **lösbares Gleichungssystem**

Parameterwahl:

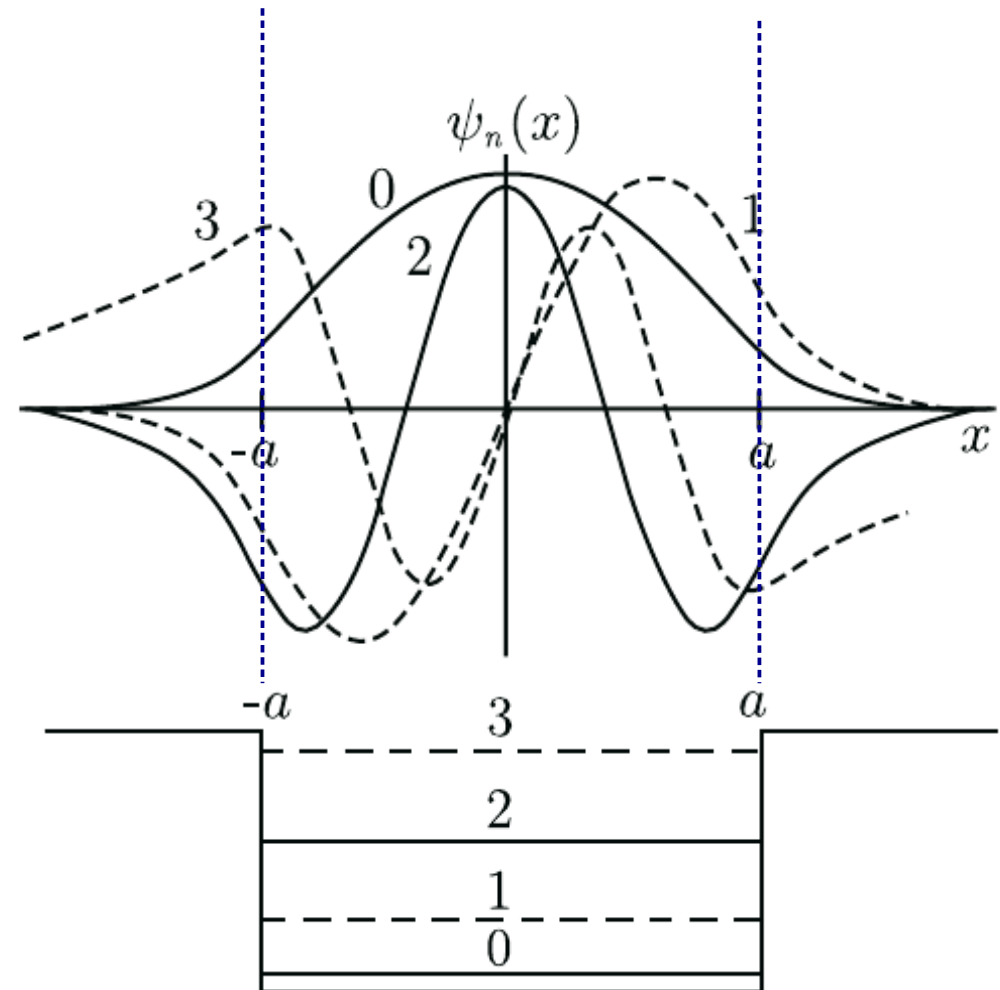


aus: F. Schwabl, Quantenmechanik (QM1), Springer 2007

Parameterwahl:

■ $a = \hbar = m = 1$

■ $V_0 = 12.5$



aus: F. Schwabl, Quantenmechanik (QM1), Springer 2007

Parameterwahl:

■ $a = \hbar = m = 1$

■ $V_0 = 12.5$

■ Zwei **gerade** Lösungen
(durchgezogene Linien)

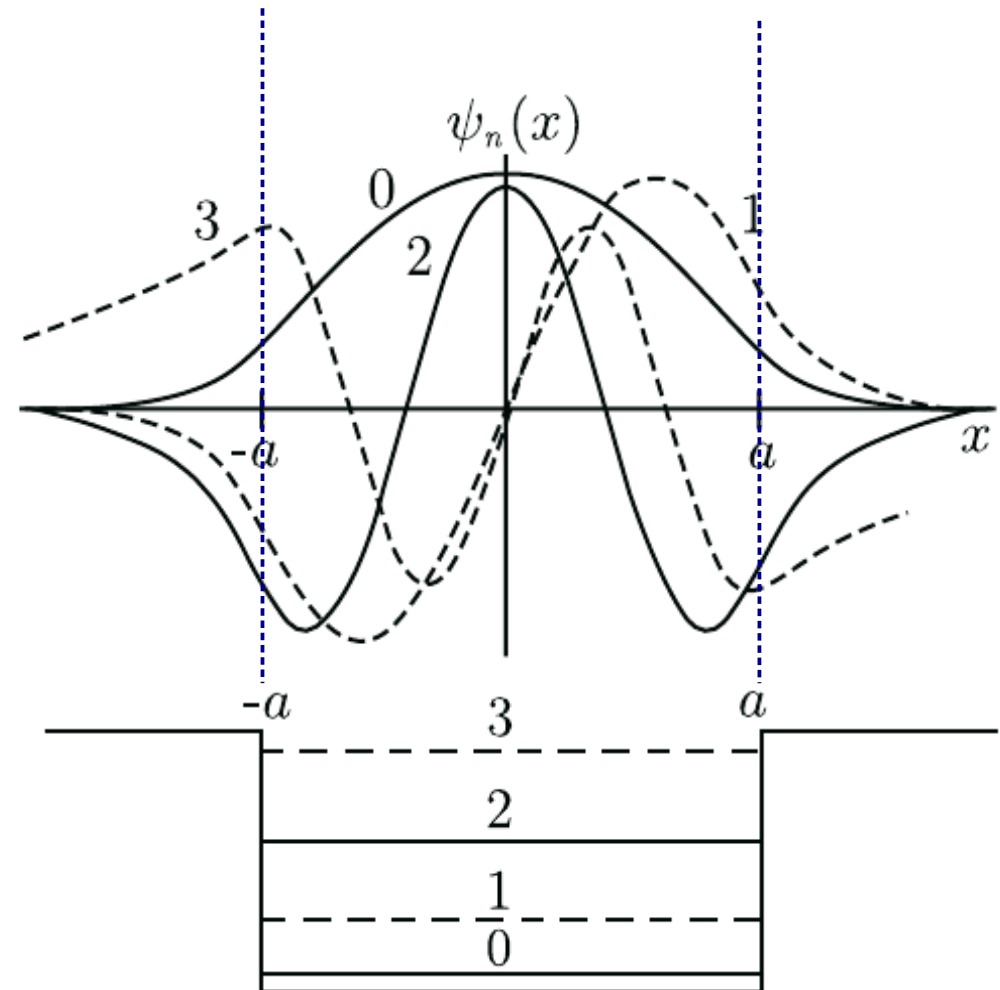
■ $E_0 = -11.65$

■ $E_2 = -5.14$

■ Zwei **ungerade** Lösungen
(gestrichelte Linien)

■ $E_1 = -9.13$

■ $E_2 = -0.46$



aus: F. Schwabl, Quantenmechanik (QM1), Springer 2007

Parameterwahl:

■ $a = \hbar = m = 1$

■ $V_0 = 12.5$

■ Zwei **gerade** Lösungen
(durchgezogene Linien)

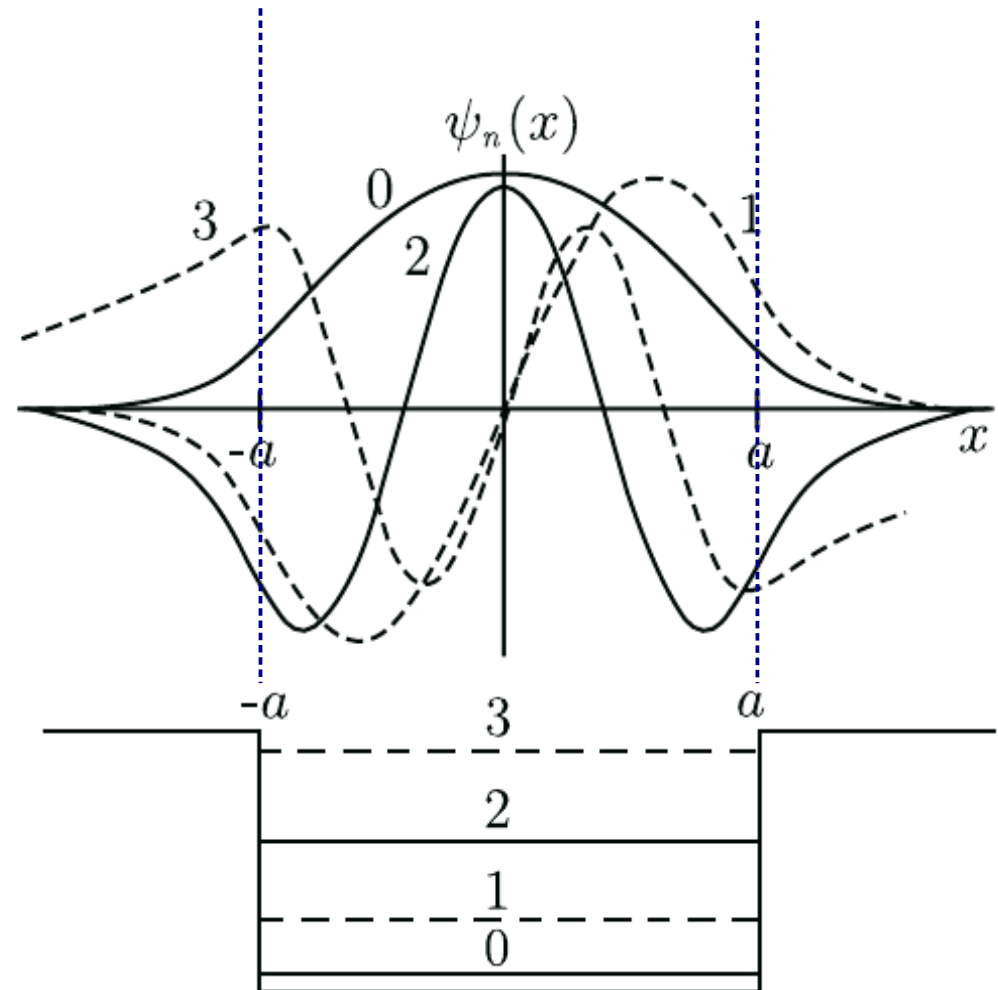
■ $E_0 = -11.65$

■ $E_2 = -5.14$

■ Zwei **ungerade** Lösungen
(gestrichelte Linien)

■ $E_1 = -9.13$

■ $E_2 = -0.46$



aus: F. Schwabl, Quantenmechanik (QM1), Springer 2007

Wellenfunktion verschwindet nicht im klassisch verbotenen Bereich !

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow (\mathbf{D}_2) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \dots & & & & \\ 1 & -2 & 1 & \dots & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & & & \dots & 1 & -2 & 1 \\ & & & \dots & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow (\mathbf{D}_2) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \dots & & & & \\ 1 & -2 & 1 & \dots & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \dots & 1 & -2 & 1 \\ & & & \dots & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$V(x) \rightarrow (\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} V_1 & \dots & & & \\ & V_2 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \dots & V_{n-1} & \\ & & \dots & & V_n \end{pmatrix}$$

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow (\mathbf{D}_2) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \dots & & & \\ 1 & -2 & 1 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \dots & 1 & -2 & 1 \\ & & & \dots & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$V(x) \rightarrow (\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} V_1 & \dots & & & \\ & V_2 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \dots & V_{n-1} & \\ & & \dots & & V_n \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{D}_2) + (\mathbf{V}) \right) (\psi) = E(\psi)$$

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow (\mathbf{D}_2) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \dots & & & \\ 1 & -2 & 1 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \dots & 1 & -2 & 1 \\ & & & \dots & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$V(x) \rightarrow (\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} V_1 & \dots & & & \\ & V_2 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \dots & V_{n-1} & \\ & & \dots & & V_n \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{D}_2) + (\mathbf{V}) \right) (\psi) = E(\psi)$$

Eigenwertproblem in n-dimensionalem Raum

lösbar mit wissenschaftlichen Standard-Bibliotheken

Es gibt auch numerische Lösungsverfahren

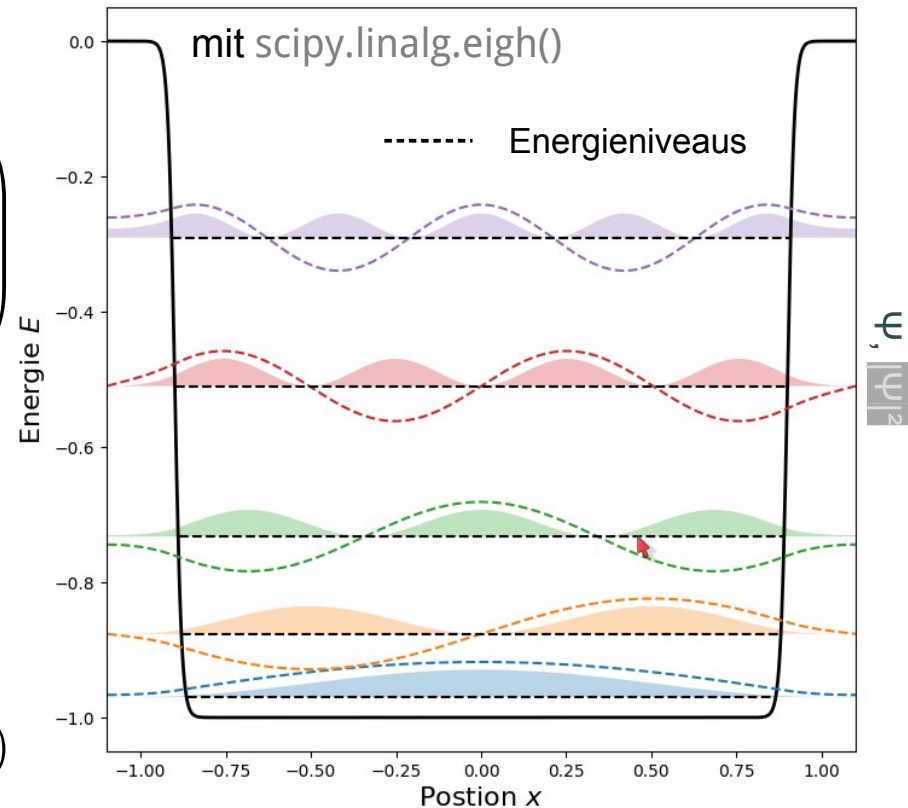
Methode: Diskretisierung von Ψ an n Stützstellen

$$\psi(x) \rightarrow (\psi) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \dots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow (\mathbf{D}_2) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & -2 & 1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & -2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$V(x) \rightarrow (\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} V_1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & V_2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & V_{n-1} & \\ \dots & & & & V_n \end{pmatrix}$$

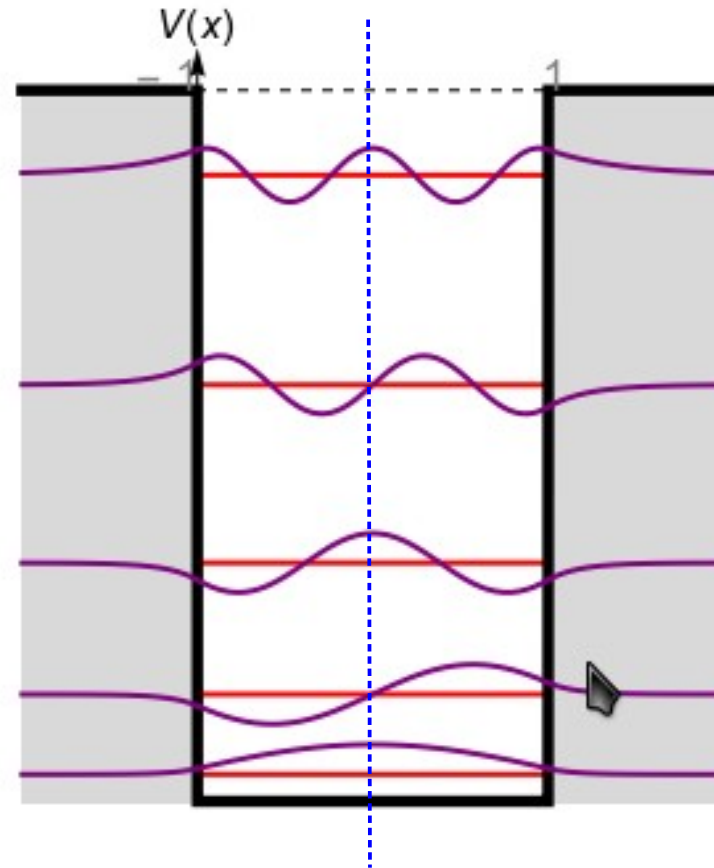
$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{D}_2) + (\mathbf{V}) \right) (\psi) = E(\psi)$$



Eigenwertproblem in n-dimensionalem Raum

lösbar mit wissenschaftlichen Standard-Bibliotheken

Lösung mit Mathematica:



[https://demonstrations.wolfram.com/
BoundStatesOfAFinitePotentialWell.cdf](https://demonstrations.wolfram.com/BoundStatesOfAFinitePotentialWell.cdf)

Ende VL 07

und Zeit für Fragen ?