

# Lernhilfe zur Diplomprüfung Quantenmechanik

Diese Zusammenfassung wurde für die Vorbereitung auf meine Diplomprüfung erstellt. Bei Fehlern bitte ich um Korrekturhinweise.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Historische Einführung</b>	<b>3</b>
1.0.1	Interferenz und Beugung . . . . .	3
1.0.2	Der äußere Photoeffekt . . . . .	3
1.0.3	Compton-Effekt . . . . .	3
1.0.4	Impuls eines Photons . . . . .	3
1.1	Atommodelle & Korrespondenzprinzip . . . . .	3
1.1.1	Bohrsches Atommodell . . . . .	3
1.2	Materiewellen . . . . .	3
1.3	Welle-Teilchen-Dualismus . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Wellenmechanik</b>	<b>4</b>
2.1	Schrödingergleichung . . . . .	4
2.2	Bedeutung von $\psi$ . . . . .	4
2.3	Wahrscheinlichkeitsstromdichte . . . . .	4
2.4	Ehrenfest Theorem . . . . .	5
2.5	Zeitunabhängige (zeitfreie) Schrödingergleichung . . . . .	5
2.6	1-dimensionale Quantensysteme . . . . .	5
2.6.1	Stückweise konstante Potentiale . . . . .	5
2.6.2	Tunneleffekt . . . . .	7
2.6.3	Streuprobleme . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Allgemeiner Formalismus der QM</b>	<b>7</b>
3.1	Vektoren & Operatoren . . . . .	7
3.1.1	Bra- und Ket-Vektoren . . . . .	7
3.1.2	Operatoren . . . . .	8
3.1.3	Matrix-Darstellung von Operatoren . . . . .	8
3.1.4	Eigenwertprobleme . . . . .	8

3.2	Physikalische Interpretation . . . . .	8
3.2.1	Observable . . . . .	8
3.2.2	Messprozess . . . . .	9
3.2.3	Erwartungswert . . . . .	9
3.2.4	Streuung . . . . .	10
3.2.5	Verträgliche und nicht verträgliche Observable . . . . .	10
3.2.6	Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation . . . . .	10
3.2.7	Zeitliche Entwicklung . . . . .	10
3.2.8	Energie-Zeit-Unschärfefunktion . . . . .	12
3.2.9	Matrizenmechanik . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Wasserstoffatom</b>	<b>12</b>
4.1	Drehimpuls . . . . .	12
4.2	Stationäre Zustände des Wasserstoffatoms . . . . .	12

# 1 Historische Einführung

## 1.0.1 Interferenz und Beugung

2 kohärente Lichtquellen (punktförmig) im Abstand  $d$  zueinander ergeben ein Interferenzstreifen. Damit lässt sich Wellennatur des Lichtes bestätigen.

## 1.0.2 Der äußere Photoeffekt

Licht löst Elektronen aus einem Metall aus. Die kinetische Energie der austretenden Teilchen  $E_{kin} = \frac{m}{2}v^2$ , die Messung ergibt eine Gleichheit zur Gegenspannung  $\frac{m}{2}v^2 = eU$ . Hertz konnte zeigen, dass der Strom proportional zur Intensität der Strahlung, die kinetische Energie hängt nur von der Frequenz (nicht von der Intensität) ab. Nach Einstein muss Licht aus Teilchen der Energie  $h\nu = W_{ausl} + \frac{m_0}{2}v^2$  bestehen, die sich mit der Geschwindigkeit  $c$  bewegen.

## 1.0.3 Compton-Effekt

Streuung von Röntgenstrahlung an freien (oder schwach gebundenen) Elektronen. Photon gibt einen Teil seiner Energie beim Stoß mit einem Elektron ab (gestreute Wellenlänge daher größer).

## 1.0.4 Impuls eines Photons

Photonen haben keine Ruhemasse (ansonsten wäre Masse der bewegten Photonen unendlich), Impuls  $p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

## 1.1 Atommodelle & Korrespondenzprinzip

### 1.1.1 Bohrsches Atommodell

### 1.2 Materiewellen

In Analogie zu Licht vermutet de Broglie,  $p^i = \hbar k^i$  auch für Materie gültig. Mit  $p^i p_i = p^2 - \frac{E^2}{c^2} = -m_0^2 c^2$  folgt  $\omega(k) = c\sqrt{k^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}}$  als Dispersionsrelation, womit sich die Phasengeschwindigkeit  $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v}$  und die Gruppengeschwindigkeit  $v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = v$  ergeben. Überzeugende Schlussfolgerung: Teilchengeschwindigkeit ist gleich der Gruppengeschwindigkeit. Alle Experimente bestätigen Schlussfolgerung (Beugung von Elektronenstrahlen, Protonenstrahl-Interferenzen uvm.)

### 1.3 Welle-Teilchen-Dualismus

$p^i = \hbar k^i \Rightarrow$  Teilchen = Wellenpaket? XXX

## 2 Wellenmechanik

Ebene Welle

$$e^{i(kx-\omega t)} = e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

### 2.1 Schrödingergleichung

Allgemeine Lösung  $\psi(x, t) = \int f(k') e^{i(kx-\omega't)} d^3k'$  mit  $\hbar\omega' = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2 + V(x)$  ergibt lineare Differentialgleichung 1. Ordnung bezüglich der Zeit, Schrödingergleichung für ein Teilchen im Potential  $V(x)$  genannt,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar}{2m} \Delta + V(x) \right] \Delta \psi(x, t)$$

Kann als quantentheoretische Übersetzung von  $E = \frac{p^2}{2m}$  gesehen werden, wenn  $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  und  $p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$  gesetzt werden.

#### Operatorformulierung

Mit Impulsoperator  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ , Ortsoperator  $\hat{x}$  und Hamiltonoperator  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$

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

### 2.2 Bedeutung von $\psi$

$\psi$  wird Wellenfunktion, Zustandsfunktion oder Zustandsvektor genannt.  $|\psi(x, t)|^2$  kann als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Damit ist  $\psi^* \psi d^3x$  die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Teilchen zur Zeit  $t$  im Volumenelement  $d^3x$  am Ort  $x$  anzutreffen. Das Integral über den ganzen Raum dient als Normierungsbedingung  $\int \psi^* \psi d^3x = 1$ .

#### Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformierte  $\phi(p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} px} d^3x$  erlaubt eine ähnliche Interpretation im Impulsraum.  $\phi^* \phi d^3p$  ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Impuls eines Teilchens zur Zeit  $t$  im Volumenelement  $d^3p$  an der Stelle  $p$  zu finden ist.

### 2.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

**hermitsch:** Einen Operator  $\hat{H}$  für den  $\int \psi^* (\hat{H} \psi) d^3x = \int (\hat{H} \psi)^* \psi d^3x$  für jede Funktion seines Definitionsbereiches gilt, nennt man hermitsch.

**Wahrscheinlichkeitsstromdichte:** XXX

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \text{Re} \left( \psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \psi \right)$$

## 2.4 Ehrenfest Theorem

Mittelwert des Ortes:  $\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi d^3x$

Mittelwert des Impulses:  $\langle p \rangle = \int \phi^* p \phi d^3p = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi d^3x$

Ehrenfest Theorem:  $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle F \rangle$  XXX

## 2.5 Zeitunabhängige (zeitfreie) Schrödingergleichung

$\hat{H}$  hänge nicht explizit von der Zeit ab (bisher erfüllt), dann folgt mit dem Ansatz  $\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i\omega t} = \varphi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  die Gleichung  $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} E \psi$ , womit sich die zeitfreie Schrödingergleichung ergibt:

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \quad \text{oder} \quad \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x)$$

## 2.6 1-dimensionale Quantensysteme

Gesucht sind stationäre Zustände der zeitfreien Schrödingergleichung, wobei die Abkürzungen  $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} U(x)$  und  $E = \frac{\hbar^2}{2m} \epsilon$  genutzt werden. Man erhält Differentialgleichungen vom Sturm-Lionville-Typ.

$$\varphi'' + [\epsilon - U(x)] \varphi = 0$$

Gesucht werden Lösungen, die im gesamten Intervall endlich, stetig und differenzierbar sind. Falls  $\varphi_a$  und  $\varphi_b$  Lösungen zum selben  $\epsilon$  sind, so auch die Linearkombination von beiden.

### 2.6.1 Stückweise konstante Potentiale

**kostantes Potential**  $U = U_0 = \text{const}$ :

$\varphi = c_{1,2} e^{\pm ikx}$  mit  $k = \sqrt{\epsilon - U_0}$  ist Lösung. Für  $\epsilon > U_0$  wird  $k$  reell, die zwei Vorzeichen beschreiben Teilchenbewegung nach rechts und links, die Energie ist damit nicht quantisiert und es handelt sich um monochromatische ebene Wellen (kräftefreies Teilchen). Die Überlagerung zu Wellenpaketen ist normierbar aber nicht mehr stationär. Für  $\epsilon < U_0$  wird  $k$  imaginär, wobei entweder die positive oder die negative Lösung unendlich anwächst und es damit keine physikalisch sinnvolle Lösung gibt, aber für stückweise konstantes Potential brauchbare Lösung.

**Potentialstufe:**

Unterteilung in zwei Bereiche (I) und (II) mit  $U_2 > U_1$ , dann sind zwei Fälle möglich. Dabei wird folgende Bezeichnung gewählt  $k_i = \sqrt{\epsilon - U_i}$  für  $\epsilon > U$  oder  $\kappa_i = \sqrt{U_i - \epsilon}$  für  $\epsilon < U$ .

- $U_2 > \epsilon > U_1$ : Es ergibt sich in jedem Bereich eine Lösung, deren Vorfaktoren über die Stetigkeit von  $\varphi$  und  $\varphi'$  bestimmt werden können.

$$\varphi = \begin{cases} c_1 e^{ik_1 x} + c_2 e^{-ik_1 x} & (I) \\ c_3 e^{\kappa_2 x} + c_4 e^{-\kappa_2 x} & (II) \end{cases} \Rightarrow c_4 = 0, c_3 = c_1 + c_2, ik_1(c_1 - c_2) = \kappa_2 c_3$$

*Vergleich zum klassischen Verhalten:* Ein klassisches Teilchen bewegt sich auf den verbotenen Bereich zu, es geschieht ein elastischer Stop und es entfernt sich wieder. Das klassische Teilchen hält sich dabei nur im Bereich (I) auf.

*Quantenmechanisch:* Im Bereich (I) kommt es zu einer Überlagerung der beiden Teilchenströme (einlaufend und auslaufend), aber auch im Bereich (II) ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit größer 0 (klingt aber exponentiell ab).

*Konstruktion eines Wellenpakets (damit zeitabhängige Lösung):* Überlagerung von Lösungen mit Energien  $\epsilon'$  aus einem Intervall  $\Delta\epsilon$  um  $\epsilon$  herum. XXX

- $\epsilon > U_2 > U_1$ : Der Teilchenstrom hat höhere Energie, ein Teil wird an der Potentialkante trotzdem reflektiert.

$$\varphi = \begin{cases} e^{-ik_1 x} + R e^{ik_1 x} = \varphi_E + \varphi_R & (I) \\ S e^{-ik_2 x} = \varphi_S & (II) \end{cases}$$

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichten ergeben sich zu  $j_E = -\frac{\hbar k_1}{m}$ ,  $j_R = |R|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$  und  $j_S = -|S|^2 \frac{\hbar k_2}{m}$   
XXX

### Unendlich hohe Potentialstufe:

Im Grenzfall  $U_2 \rightarrow \infty$  geht auch  $\kappa_2 \rightarrow \infty$  und somit die Wellenfunktion in

$$\psi = \begin{cases} c \sin(k_1 x) e^{-i\omega t} & (I) \\ 0 & (II) \end{cases}$$

über. Es zeigt sich, dass  $\psi$  am Rand einer unendlich hohen Potentialstufe verschwindet.

### Unendlich hoher Potentialtopf:

Ein unendlich hoher Potentialtopf mit  $U = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ \infty & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$  besitzt die allgemeine Lösung  $\varphi = A \sin(\sqrt{\epsilon}x) + B \cos(\sqrt{\epsilon}x)$ . Mit der Randbedingung  $\varphi(\pm \frac{a}{2}) = 0$  gibt es zwei Möglichkeiten

- $A = 0, B \neq 0$  und  $\sqrt{\epsilon} \frac{a}{2} = \frac{\pi}{2} + m\pi \Rightarrow \epsilon = \left[ \frac{(2m+1)\pi}{a} \right]^2$
- $A \neq 0, B = 0$  und  $\sqrt{\epsilon} \frac{a}{2} = m\pi \Rightarrow \epsilon = \left[ \frac{2m\pi}{a} \right]^2$

Zusammengefasst ergibt sich  $\epsilon = \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$  und damit ein diskretes Spektrum der Energiewerte. XXX

## 2.6.2 Tunneleffekt

Ein Teilchenstrom von (I) trifft auf einen Bereich (II) mit Potential  $U_0 > \epsilon$  und Breite  $a$ . Der Bereich (III) hinter der Barriere kann klassisch nicht erreicht werden.

$$\varphi = \begin{cases} e^{-ikx} + Re^{ikx} & (I) \\ Ae^{\kappa_0 x} + Be^{-\kappa_0 x} & (II) \\ Se^{-ikx} & (III) \end{cases}$$

Die Koeffizienten können wiederum durch die Stetigkeit von  $\varphi$  und  $\varphi'$  bestimmt werden. Die Transmission gelingt mit einer Wahrscheinlichkeit  $T = |S|^2$  und die Reflexion mit  $|R|^2 = 1 - T$ .

$$T = |S|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m_0 V_0 a^2}{2\hbar^2}}$$

Der Tunneleffekt ist damit um so stärker, je flacher und schmaler der Potentialwall ist.

## 2.6.3 Streuprobleme

**Ungebundene Zustände:** Haben keine Einschränkung bei der Wahl der Zustände und somit ein kontinuierliches Spektrum. Sie sind nicht normierbar, außer man fasst sie zu Wellenpaketen zusammen, dann aber nicht stationär

**Gebundene Zustände:** Haben ein diskretes Spektrum und sind damit normierbar.

# 3 Allgemeiner Formalismus der QM

## 3.1 Vektoren & Operatoren

### 3.1.1 Bra- und Ket-Vektoren

$\psi$  oder  $\phi$  sind Darstellungen eines Vektors  $|\psi(t)\rangle$  im unendlich dimensionalen Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$ . Er wird als Ket-Vektor bezeichnet und ist Basis einer verallgemeinerbaren Schreibweise. Ein Ket-Vektor lässt sich als Spaltenvektor darstellen. Das Skalarprodukt setzt eine weitere Form - den Bra-Vektor  $\langle\psi(t)|$  - voraus, der sich als Zeilenvektor darstellen lässt.

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i b_i^* a_i$$

In Matrix-Darstellung spricht man beim Wechsel zwischen  $|\psi(t)\rangle$  und  $\langle\psi(t)|$  vom Adjungieren. Dabei werden Zeilen & Spalten vertauscht und die Elemente komplex konjugiert ( $A_{ik}^+ = A_{ki}^*$ ). Man erhält damit

$$\langle\psi(t)| = |\psi(t)\rangle^+$$

### 3.1.2 Operatoren

Ein Operator  $\hat{A}$  ist eine in einer Teilmenge von  $\mathcal{H}$  definierte Funktion mit Werten aus  $\mathcal{H}$ , d.h. eine Umordnung, die gewisse Elemente von  $|\psi(t)\rangle$  gewisse Elemente von  $\mathcal{H}$   $|\psi(t)\rangle$  zuordnet.

Man definiert den Kommutator  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  und nennt Operatoren mit verschwindendem Operator vertauschbare Operatoren. Ferner gilt

$$\left(\langle\phi|\hat{A}\right)|\psi\rangle = \langle\phi|\left(\hat{A}|\psi\rangle\right) = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$$

Für einen hermiteschen (symmetrischen) Operator gilt:

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^+$$

Diese Regel gilt auch für das dyadische Produkt:

$$|\psi\rangle\langle\phi| = (|\phi\rangle\langle\psi|)^+$$

Für einen selbstadjungierten Operator gilt :

$$\hat{A} = \hat{A}^+$$

### 3.1.3 Matrix-Darstellung von Operatoren

XXX

### 3.1.4 Eigenwertprobleme

XXX

Die Eigenwerte von selbstadjungierten Operatoren sind reell.

## 3.2 Physikalische Interpretation

### 3.2.1 Observable

Messbaren physikalischen Größen sind die selbstadjungierten Operatoren des Hilbert-Raumes eindeutig zugeordnet, man nennt sie Observablen. Mögliche Messwerte entsprechen den Eigenwerten des zugehörigen Operators einer Observablen.

Das Korrespondenzprinzip lässt sich verallgemeinern: Die Operatoren, die den kartesischen Orts- und Impulskoordinaten eines Teilchens zugeordnet sind, haben ein rein kontinuierliches Eigenwertspektrum und es gelten die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen.

$$[\hat{q}_j, \hat{q}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad [\hat{p}_j, \hat{q}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \hat{1}$$



### 3.2.2 Messprozess

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch einen Vektor  $|\psi(t)\rangle$  charakterisiert. In der quantenmechanischen Betrachtung ist nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage über zu erwartende Messwerte der Observablen möglich. Bei Messung einer Observablen  $A$  mit zugehörigem Operator  $\hat{A}$  kommen die Eigenwerte  $a_n$  (oder im kontinuierlichen Fall  $a(n)$ ) in Frage.

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle \quad \hat{A}|\psi(n)\rangle = a(n)|\psi(n)\rangle$$

Ohne Entartung ergibt sich  $|\psi(t)\rangle$  in  $A$ -Darstellung zu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n(t)\rangle + \int dn c(n) |\psi(n)\rangle$$

mit der Wahrscheinlichkeit  $w_n = |c_n|^2$  den Messwert  $a_n$ , beziehungsweise  $w(m)dn = |c(n)|^2 dn$  den Messwert im Intervall  $a(n) \dots a(n+dn)$  zu erhalten.

**Parsevalsche Gleichung:** Die Summe der Wahrscheinlichkeiten muss gleich 1 sein, beziehungsweise die identische Formulierung als Normierungsbedingung

$$\| |\psi(t)\rangle \|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 + \int dn |c(n)|^2 = 1$$

**Zustandsänderung bei der Messung:** Der undefinierte Zustand  $|\psi\rangle$  eines Systems geht unmittelbar nach der Messung eines Eigenwertes  $a_n$  in den zugehörigen Eigenvektor  $|\psi_n\rangle$  über. Der Zustand  $|\psi\rangle$  springt bei der Messung von  $A$  mit einer Wahrscheinlichkeit  $|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$  in den Zustand  $|\psi_n\rangle$ , es kommt zu einer akausalen Zustandsänderung. Es ist somit sichergestellt, dass bei einer sofortigen Messwiederholung der gleiche Messwert ermittelt wird.

Im Falle des kontinuierlichen Spektrums wird man nur mit einer Genauigkeit  $\Delta a$  messen können und feststellen, dass  $a(n)$  in einem Intervall liegt. Der Systemzustand geht mit der Messung in einen "Fast-Eigenvektor" über.

### 3.2.3 Erwartungswert

Der Erwartungswert oder Mittelwert von  $\hat{A}$  ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \langle A \rangle = \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n w_n a_n = \sum_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle a_n \\ &= |\psi\rangle \left[ \sum_n |\psi_n\rangle a_n \langle \psi_n| \right] \langle \psi| \\ &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Ist  $\hat{A}$  selbstadjungiert (beziehungsweise Observable) so sind die  $\langle A \rangle$  reell. Der Erwartungswert kann auch über den Projektionsoperator  $\hat{P}_n = |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$  definiert werden, womit obige Gleichung universell sowohl für diskrete wie auch kontinuierliche und entartete Zustände gültig ist.

### 3.2.4 Streuung

In der Statistik wird die Streuung oder Varianz als mittlere quadratische Abweichung definiert. Analog dazu muss in der Quantenmechanik gesetzt werden:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{1})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2$$

### 3.2.5 Verträgliche und nicht verträgliche Observable

Zwei Observable sind verträglich, wenn ein vollständig Orthonormales System aus gemeinsamen Eigenvektoren existiert. Ergibt die Messung eines Zustandes  $|\psi_n\rangle$  mit dem Operator  $\hat{A}$  mit Sicherheit den Wert  $a_n$  und die mit  $\hat{B}$  den Wert  $b_n$ , dann sind die Observablen  $A$  und  $B$  gleichzeitig scharf messbar und man nennt die Observablen vertauschbar (gleichzeitig gilt  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ). XXX

### 3.2.6 Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation

Seien  $A$  und  $B$  zwei nichtverträgliche Observable ( $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ), dann gilt

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

Die bekannteste Form ist der Spezialfall  $\hat{A} = \hat{p}_k$  und  $\hat{B} = \hat{q}_k$ . Es folgt für den Kommutator  $[\hat{p}_k, \hat{q}_k] = \frac{\hbar}{i} \hat{1}$  und damit

$$\Delta p_k \Delta q_k \geq \frac{\hbar}{2}$$

### 3.2.7 Zeitliche Entwicklung

#### Schrödinger Bild

So lange keine Messung stattgefunden hat, gilt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar |\dot{\psi}_S(t)\rangle = \hat{H} |\psi_S(t)\rangle$$

Bei Bewegung in einem zeitunabhängigen Potential  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x})$  kann die zeitliche Entwicklung umformuliert werden zu

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

mit dem unitären Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0)$ . Er wird definiert durch die zwei Gleichungen  $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$  und  $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ . Durch Messung eines vollständigen Satzes verträglicher Observablen  $A, B, C, \dots$  wird ein Anfangszustand  $|\psi_S(t_0)\rangle = |abc\dots\rangle$  präpariert. Die weitere zeitliche Entwicklung wird durch den Zeitentwicklungsoperator bestimmt. Eine erneute Messung führt zu einer Zustandsreduktion. Im Schrödinger-Bild ändern sich Operatoren, die nicht explizit zeitabhängig sind, zeitlich nicht. Insbesondere sind Orts- und Impulsoperatoren zeitunabhängig.

Im Spezialfall eines nicht explizit zeitabhängigen Hamilton-Operators, ergibt sich der Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right] = 1 + \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t - t_0) + \dots + \frac{1}{n!(i\hbar)^n} \hat{H}^n(t - t_0)^n + \dots$$

In diesem Sonderfall kann eine (scharfe) Energiemessung für  $t = t_0$  durchgeführt werden und es zeigt sich, dass es sich um einen stationären Zustand handelt (der Phasenfaktor ist physikalisch ohne Bedeutung)

$$\begin{aligned} |\psi_S(t_0)\rangle &= |E\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle &= \hat{H} |\psi_S(t)\rangle \\ \Rightarrow |\psi_S(t)\rangle &= e^{\frac{E}{i\hbar}(t-t_0)} |E\rangle \end{aligned}$$

### Heisenbergbild

Ein Operator im Schrödinger-Bild  $\hat{A}_S$  geht in das Heisenberg-Bild (Index H) über, indem eine unitäre Transformation durchgeführt wird.

$$\hat{A}_H = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0) \quad \text{und} \quad |\psi_H\rangle = \hat{U}^{-1}(t, t_0) |\psi_S\rangle$$

Damit ist ein Zustand des Systems  $|\psi_H\rangle = \hat{U}^{-1}(t, t_0) |\psi_S\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$  zeitunabhängig, dafür ist  $\hat{A}_H$  auch dann zeitabhängig, wenn  $\hat{A}_S$  nicht explizit von der Zeit abhängt. Es ergibt sich eine *Bewegungsgleichung für einen Operator* im Heisenbergbild

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + i\hbar \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$$

Falls  $\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = 0$  und  $[\hat{A}_H, \hat{H}_H] = 0$ , so nennt man  $\hat{A}_H$  eine Erhaltungsgröße. Für eine Erhaltungsgröße ist die statistische Verteilung der Messwerte unabhängig vom Messzeitpunkt. Ein einmal scharf gemessener Wert, behält diesen Wert im weiteren zeitlichen Verlauf. Für ein konservatives System ( $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ ) ist  $H$  eine Erhaltungsgröße.

### Korrespondenzprinzip

Im Heisenberg-Bild wird die zeitliche Entwicklung des Quantensystems als zeitliche Entwicklung der Observablen beschrieben. Die Analogie zur klassischen Theorie ist sehr weitgehend.

klassisch	quantenmechanisch
$A = A(q_k, p_k, t)$ und $H = H(q_k, p_k, t)$	$\hat{A}_H = A(\hat{q}_k^H, \hat{p}_k^H, t)$ und $\hat{H}_H = H(\hat{q}_k^H, \hat{p}_k^H, t)$
$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$ mit Poissonklammer	$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$ mit Kommutator
$\frac{dq_k}{dt} = \{q_k, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_k}$	$\frac{d\hat{q}_k^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{q}_k^H, \hat{H}_H] = \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{p}_k^H}$
$\frac{dp_k}{dt} = \{p_k, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$	$\frac{d\hat{p}_k^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_k^H, \hat{H}_H] = -\frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{q}_k^H}$

### 3.2.8 Energie-Zeit-Unschärfefunktion

Die Vierervektoren  $p^i = (p_x, p_y, p_z, E/c)$  und  $x^i = (x, y, z, ct)$  der speziellen Relativitätstheorie lassen mit der Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation  $\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$  auch eine analoge Beziehung zwischen Energie und Zeit vermuten. Allerdings ist der Zeit in der Quantenmechanik kein Operator zugeordnet, daher muss eine andere Herangehensweise betrachtet werden.

Seien  $\hat{H}$  und  $\hat{A}$  nicht explizit zeitabhängig, so erhält man im Heisenbergbild (3.2.7) mit der Definition der Streuung (3.2.4) durch Bildung des Erwartungswertes und Betrages

$$\hbar \left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right| = \left| \langle \hat{A}, \hat{H} \rangle \right|$$

Mit der Schwarzschen Ungleichung  $\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle \hat{A}, \hat{H} \rangle \right|$  erhält man

$$\Delta E \cdot \frac{\Delta A}{\left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Dabei findet man in  $\Delta t = \Delta A / \left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|$  eine charakteristische Zeitdauer, in der sich die statistische Verteilung der Messwerte von A signifikant ( $\langle \hat{A} \rangle$  ändert sich näherungsweise um  $\Delta A$ ) ändert. Da die Betrachtung für beliebige nicht explizit zeitabhängige Observablen gilt, muss sie auch für eine so definierte minimale Zeitdauer eingehalten werden, womit man die erwartete Beziehung erhält.

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

### 3.2.9 Matrizenmechanik

Das Heisenberg-Bild in Energiedarstellung führt zur Heisenbergschen Matrizenmechanik. Der Ortsoperator ergibt sich in Matrix-Darstellung  $x_{nm}$  zu

$$\hat{x}_H = \hat{1} \hat{x}_H \hat{1} = \sum_{n,m} |E_m\rangle \underbrace{\langle E_n | x_H | E_m \rangle}_{x_{nm}} \langle E_n |$$

Analog lässt sich der Impulsoperator in Matrix-Darstellung aufschreiben. Für den Hamilton-Operator reicht auch eine Diagonalmatrix. Die Zeitabhängigkeit beispielsweise von  $x_{nm}$  ergibt sich zu

$$x_{nm} = \langle E_n | \hat{x}_H | E_m \rangle = \langle E_n | \hat{U}^\dagger \hat{x}_S \hat{U} | E_m \rangle = e^{\frac{1}{i\hbar}(E_m - E_n)(t - t_0)} \langle E_n | \hat{x}_S | E_m \rangle$$

## 4 Wasserstoffatom

### 4.1 Drehimpuls

### 4.2 Stationäre Zustände des Wasserstoffatoms