1. Grundlagen der nichtrelativistischen Quantenmechanik

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

1. Grundlagen der nichtrelativistischen Quantenmechanik

- Inhalt:

  sehr kurze Wiederholung der wesentlichen Elemente der nichtrelativistischen Quantenmechanik aus dem BSc-Studium

1. Grundlagen der nichtrelativistischen Quantenmechanik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Inhalt:

  sehr kurze Wiederholung der wesentlichen Elemente der nichtrelativistischen Quantenmechanik aus dem BSc-Studium

- Ziel:
  - Einleitung der Vorlesung insgesamt
  - u.a. Vorbereitung für die relativistische QM ($\rightarrow$ analoges Vorgehen)

1.1 Heuristischer Zugang: Vom Welle-Teilchen-Dualismus zur Schrödinger-Gleichung

1.1 Heuristischer Zugang: Vom Welle-Teilchen-Dualismus zur Schrödinger-Gleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Welle-Teilchen-Dualismus

  ebene Welle $\psi(\vec{r}, t) \sim e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ entspricht einem Teilchen mit

  - Energie $E = \hbar\omega$ (Einstein 1905; Photoeffekt)
  - Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (de Broglie 1924)

1.1 Heuristischer Zugang: Vom Welle-Teilchen-Dualismus zur Schrödinger-Gleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Welle-Teilchen-Dualismus

  ebene Welle $\psi(\vec{r}, t) \sim e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ entspricht einem Teilchen mit
  - Energie $E = \hbar\omega$ (Einstein 1905; Photoeffekt)
  - Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (de Broglie 1924)

  motiviert die Einführung hermitescher Operatoren:
  - $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \hat{E}\,\psi = \hbar\omega\,\psi$
  - $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad \Rightarrow \quad \hat{\vec{p}}\,\psi = \hbar\vec{k}\,\psi$

1.1 Heuristischer Zugang: Vom Welle-Teilchen-Dualismus zur Schrödinger-Gleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Welle-Teilchen-Dualismus

  ebene Welle $\psi(\vec{r}, t) \sim e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ entspricht einem Teilchen mit
  - Energie $E = \hbar\omega$ (Einstein 1905; Photoeffekt)
  - Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (de Broglie 1924)

  motiviert die Einführung hermitescher Operatoren:
  - $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \hat{E}\,\psi = \hbar\omega\,\psi$
  - $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad \Rightarrow \quad \hat{\vec{p}}\,\psi = \hbar\vec{k}\,\psi$

- Nichtrelativistische Energie-Impuls-Beziehung: $E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V$

1.1 Heuristischer Zugang: Vom Welle-Teilchen-Dualismus zur Schrödinger-Gleichung

- Welle-Teilchen-Dualismus

  ebene Welle $\psi(\vec{r}, t) \sim e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ entspricht einem Teilchen mit
  - Energie $E = \hbar\omega$ (Einstein 1905; Photoeffekt)
  - Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (de Broglie 1924)

  motiviert die Einführung hermitescher Operatoren:
  - $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \hat{E}\,\psi = \hbar\omega\,\psi$
  - $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad \Rightarrow \quad \hat{\vec{p}}\,\psi = \hbar\vec{k}\,\psi$
- Nichtrelativistische Energie-Impuls-Beziehung: $E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V$

$\Rightarrow$ Schrödinger-Gleichung: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V\Big)\psi \equiv H\psi$

- Hamilton-Operator: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- freie Schrödinger-Gleichung ($V = 0$): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- freie Schrödinger-Gleichung ($V = 0$): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi$

  komplex konjugierte Gl.: $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi^*$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- freie Schrödinger-Gleichung ($V = 0$): $$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi \quad \Big| \times \frac{1}{i\hbar} \psi^*$$

  komplex konjugierte Gl.: $$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi^*$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$

  komplex konjugierte Gl.:
  $$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\,\psi^*$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$

  komplex konjugierte Gl.: $$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\,\psi^* \quad \Big| \times -\frac{1}{i\hbar}\psi$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\,\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\,\psi - \psi\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\,\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*}_{=\,\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)} = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\,\psi - \psi\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\,\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*}_{=\,\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)} = \underbrace{-\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\,\psi - \psi\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)}_{=\,-\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^*\right)}$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\,\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\,\psi - \psi\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) = -\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^*\right)$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Kontinuitätsgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$: keine physikalische Observable

  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte,
  das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu finden

- $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi\right)\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi\right)\psi^*$$
  $$\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\right)\psi = +\frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)\psi$$

  $$\Rightarrow\quad \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\,\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\,\psi - \psi\vec{\nabla}^2\,\psi^*\right)$$
  $$\frac{\partial}{\partial t}\,(\psi^*\psi) = -\,\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^*\right)$$

  funktioniert offensichtlich auch mit reellem Potenzial V

- $\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^{*}\psi\right) = -\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^{*}\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^{*}\right)$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = -\frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla} \cdot \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad \text{Kontinuitätsgleichung}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \psi^* \left(\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla} \right) \psi$$

- $\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = -\frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla} \cdot \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$

  $\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0}$ Kontinuitätsgleichung

  Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$

  Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

  $$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \psi^* \left(\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla} \right) \psi$$

- Beispiel: $\psi(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$

- $\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^*\right)$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0}$$ Kontinuitätsgleichung

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho = \psi^*\psi = |\psi|^2$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\,\psi - \psi\vec{\nabla}\,\psi^*\right) \equiv \frac{\hbar}{2mi}\psi^*\left(\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla}\right)\psi$$

- Beispiel: $\psi(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ $\quad\rightarrow\quad$ Übungen

Wahrscheinlichkeitserhaltung

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

Wahrscheinlichkeitserhaltung

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

  $\Rightarrow \quad \frac{dQ}{dt} = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \frac{\partial \rho}{\partial t}$

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

  $$\Rightarrow \quad \frac{dQ}{dt} = \int_{\mathcal{V}} d^3r\, \frac{\partial \rho}{\partial t} \overset{\text{K.G.}}{=} -\int_{\mathcal{V}} d^3r\, \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$$

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

  $$\Rightarrow \quad \frac{dQ}{dt} = \int_{\mathcal{V}} d^3r\, \frac{\partial \rho}{\partial t} \overset{\text{K.G.}}{=} -\int_{\mathcal{V}} d^3r\, \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \overset{\text{Gauß}}{=} -\oint_{\partial\mathcal{V}} d^2\vec{\sigma} \cdot \vec{j}$$

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

  $$\Rightarrow \quad \frac{dQ}{dt} = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \frac{\partial \rho}{\partial t} \overset{\text{K.G.}}{=} -\int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \overset{\text{Gauß}}{=} -\oint\limits_{\partial\mathcal{V}} d^2\vec{\sigma} \cdot \vec{j}$$

  zeitliche Änderung der in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"enthaltenen Ladung
  = -Strom durch die Oberfläche von $\mathcal{V}$

Wahrscheinlichkeitserhaltung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Erinnerung: Die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

  gilt immer, wenn es Erhaltungsgrößen gibt.

  Beispiel Elektrodynamik:
  Ladungserhaltung; ρ = Ladungsdichte, $\vec{j}$ = (elektr.) Stromdichte

- Integration über ein Volumen $\mathcal{V}$:

  $Q(t) = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \rho(\vec{r}, t)$ in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"

  $$\Rightarrow \quad \frac{dQ}{dt} = \int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \frac{\partial \rho}{\partial t} \overset{\text{K.G.}}{=} -\int\limits_{\mathcal{V}} d^3r\, \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \overset{\text{Gauß}}{=} -\oint\limits_{\partial\mathcal{V}} d^2\vec{\sigma} \cdot \vec{j}$$

  zeitliche Änderung der in $\mathcal{V}$ enthaltene „Ladung"enthaltenen Ladung
  = -Strom durch die Oberfläche von $\mathcal{V}$

- QM: Q = Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen in $\mathcal{V}$ zu finden
  (bei korrekter Normierung $\int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |\psi|^2 = 1$)

1.3 Formalerer Zugang zur QM

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisherige Diskussion: Wellenmechanik in Ortsraumdarstellung
  - (relativ) anschaulich
  - nicht immer besonders praktisch

1.3 Formalerer Zugang zur QM

- Bisherige Diskussion: Wellenmechanik in Ortsraumdarstellung
  - (relativ) anschaulich
  - nicht immer besonders praktisch

→ Allgemeinerer Zugang:

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisherige Diskussion: Wellenmechanik in Ortsraumdarstellung
  - (relativ) anschaulich
  - nicht immer besonders praktisch

→ Allgemeinerer Zugang:

(i) Der Zustand eines physikalischen Systems wird beschrieben durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ im Hilbert-Raum.

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisherige Diskussion: Wellenmechanik in Ortsraumdarstellung
  - (relativ) anschaulich
  - nicht immer besonders praktisch

→ Allgemeinerer Zugang:

(i) Der Zustand eines physikalischen Systems wird beschrieben durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ im Hilbert-Raum.

(ii) Die Observablen werden durch hermitesche Operatoren $\hat{A}$ dargestellt, Funktionen von Observablen durch die entsprechenden Funktionen der Operatoren (z.B. die kinetische Energie als Funktion des Impulsoperators).

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisherige Diskussion: Wellenmechanik in Ortsraumdarstellung
  - (relativ) anschaulich
  - nicht immer besonders praktisch

→ Allgemeinerer Zugang:

(i) Der Zustand eines physikalischen Systems wird beschrieben durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ im Hilbert-Raum.

(ii) Die Observablen werden durch hermitesche Operatoren $\hat{A}$ dargestellt, Funktionen von Observablen durch die entsprechenden Funktionen der Operatoren (z.B. die kinetische Energie als Funktion des Impulsoperators).

(iii) Die möglichen Messergebnisse entsprechen den Eigenwerten von $\hat{A}$.

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} .$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \ .$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(v) Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \, .$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(v) Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert a_n zu finden: $|c_n|^2$.

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}\ .$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(v) Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert a_n zu finden: $|c_n|^2$.

$\Rightarrow$ Mittelwert vieler Messungen an identisch präparierten Systemen („Erwartungswert"):

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \,.$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(v) Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert a_n zu finden: $|c_n|^2$.

$\Rightarrow$ Mittelwert vieler Messungen an identisch präparierten Systemen („Erwartungswert"):

$$\langle \hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

denn: $$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle m|\hat{A}|n\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n\, a_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

1.3 Formalerer Zugang zur QM

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(iv) Die entsprechenden Eigenzustände $|n\rangle$, d.h. $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, bilden eine vollständige orthonormale Basis des Hilbert-Raums:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \, .$$

(Bei kontinuierlichen Spektren kann man dies auf δ-Funktionen und Integrale verallgemeinern.)

(v) Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert a_n zu finden: $|c_n|^2$.

$\Rightarrow$ Mittelwert vieler Messungen an identisch präparierten Systemen („Erwartungswert"):

$$\langle \hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

denn: $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle m|\hat{A}|n\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \, a_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n |c_n|^2 a_n$

= Summe über die Messwerte gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit. ✓

Zeitentwicklung

Zeitentwicklung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen,
geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

Zeitentwicklung

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen,
geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Zeitentwicklung

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen,
geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle$$

Zeitentwicklung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen, geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n|\psi(0)\rangle$$

Zeitentwicklung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen,
geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n|\psi(0)\rangle$$

(viii) spezielle Darstellungen:

Zeitentwicklung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen,
geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n|\psi(0)\rangle$$

(viii) spezielle Darstellungen:

- Ortsraumdarstellung: $\psi(\vec{r},t) = \langle\vec{r}|\psi(t)\rangle$, $|\vec{r}\rangle$: Eigenzust. des Ortsop.

Zeitentwicklung

(vi) Wird bei einer Messung der Wert a_n gemessen, geht der ursprüngliche Zustand $|\psi\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ über.

(vii) Solange keine Messung durchgeführt wird, wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n|\psi(0)\rangle$$

(viii) spezielle Darstellungen:

- Ortsraumdarstellung: $\psi(\vec{r}, t) = \langle\vec{r}|\psi(t)\rangle$, $|\vec{r}\rangle$: Eigenzust. des Ortsop.
- Impulsraumdarstellung: $\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \langle\vec{p}|\psi(t)\rangle$ $|\vec{p}\rangle$: " " Impulsop.

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

- Identifiziere: $A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$,

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle$$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

- Identifiziere: $A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$,

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle$$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

- Identifiziere: $A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$,

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle$$

- Zeitableitung des Heisenberg-Operators:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}$$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig

- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

- Identifiziere: $A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$,

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle$$

- Zeitableitung des Heisenberg-Operators:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H, \hat{H}\right]$$

1.4 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Äquivalente Beschreibungen:
  - Schrödinger-Bild: Zustände zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig
  - Heisenberg-Bild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig
- Erwartungswert im Schrödinger-Bild (Operator $\hat{A}_S$, Zustand $|\psi_S(t)\rangle$):

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_S(0)\rangle$$

- Identifiziere: $A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$,

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle$$

- Zeitableitung des Heisenberg-Operators:

$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H, \hat{H}\right]$ Heisenberg'sche Bewegungsgleichung