

## **VL6. Elemente der Quantenmechanik I**

**6.1. Schrödingergleichung als Wellengleichung der Materie**

**6.2. Messungen in der Quantenmechanik**

## **VL7. Elemente der Quantenmechanik II**

**7.1. Wellenpakete als Lösungen der Schrödingergleichung**

**7.2. Lösungen der Schrödingergleichung in einem Potentialfeld**

# Vorlesung 7

## Roter Faden:

Lösungen der Schrödingergleichung  
mit

- a) Wellenpaketen
- b) Rechteckpotential

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.chemie.uni-bremen.de/stoherer/skript/QM-Skript.pdf>

Und für Fourier Transformationen:

<http://math.fullerton.edu/mathews/c2003/ComplexUndergradRes.html>

<http://math.fullerton.edu/mathews/c2003/FourierTransformMod.html>

# Zum Mitnehmen

Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der QM wird gegeben durch das Quadrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl  $\Psi$ , die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt, z.B. für die Wahrscheinlichkeit  $P$  ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen gilt:

$$P=|\Psi(x,t)|^2$$

$\Psi$  ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H \Psi(x,t)=E \Psi(x,t)$$

wobei  $H$  der Hamilton-Operator und  $E$  die Energie ist

# Schrödingergleichung

Rezept zur Herleitung der Schrödingergleichung:  
Multiplizieren wir die Gesamtenergie  $E=p^2/2m+V(x)$  mit  $\Psi$  :

$$\frac{p^2}{2m}\psi + V(x)\psi = E\psi$$

Ersetzen wir E und p durch die Operatoren ergibt:

**zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**  
(eindimensionaler Fall)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi$$

**Hamilton Operator**    **Laplace Operator**

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad \text{in 3-D}$$

**zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**  
(dreidimensionaler Fall, Kurzschreibweise)

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

# Lösung der Schrödingergleichung

Lösung für zeitunabhängiges Potential:

$$E / \hbar = \omega$$

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_u(x, y, z) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Einsetzen in:

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

und

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_u \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}) = E \cdot \psi_u \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

ergibt:

$$\mathbf{H} \psi_u = E \psi_u$$

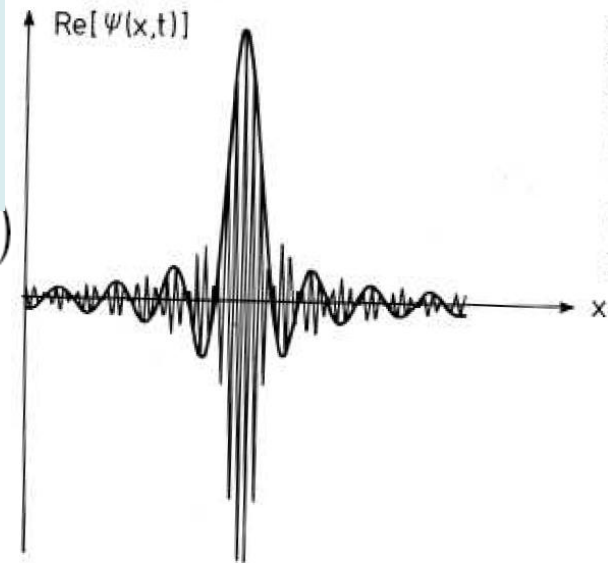
$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \quad \text{Laplace Operator} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

**Dies ist die Wellengleichung für nicht-relativistische Teilchen der Masse  $m$ .**  
**Wichtig für stationäre Probleme wie Atome! (werden nur die zeitunabh. SG benutzen!) Zeitabh. Lösung durch Multiplikation mit  $\exp(-i\omega t)$  (wie oben)**

# Superposition unendlich vieler Wellen

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} a \exp[i(kx - \omega t)] dk \quad (1)$$

Fouriertrafo  
vom Orts- zum  
Impulsraum  
für  $t=0$ !



Reihenentwicklung von  $\omega$  um  $k_0$  mit  $k = k_0 + k - k_0$  (2)

$$\text{ergibt : } \omega = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) \equiv \omega_0 + \omega' \xi \quad (3)$$

(3) + (2) in (1) ergibt:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= a \exp[-i(\omega_0 t - k_0 x)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp[-i(\omega' t - x)\xi] d\xi \\ &= a \exp[i(\omega_0 t - k_0 x)] \cdot 2 \frac{\sin(\omega' t - x)\Delta k}{(\omega' t - x)} \end{aligned}$$

$$\left( \text{Benutze : } \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \exp(-i\alpha x) dx = -\frac{1}{i\alpha} [\exp(-i\alpha \Delta x) - \exp(i\alpha \Delta x)] = 2 \frac{\sin \alpha \Delta x}{\alpha} \right)$$

**Wellenpakete SEHR lokalisiert, wenn  $x = \omega' t$ , d.h. wenn Gruppengeschwindigkeit Teilchengeschwindigkeit entspricht**

# Fourier Transformation

1. Every (sufficiently) continuous function can be unambiguously and reversibly represented by its Fourier transform:

$$\text{forward: } \tilde{g}(\omega) := \int g(x) \exp\{i\omega x\} dx, \quad (9.37)$$

$$\text{backward: } g(x) := \frac{1}{2\pi} \int \tilde{g}(\omega) \exp\{-i\omega x\} dx.$$

The real and imaginary part of  $\tilde{g}$  are also called the Fourier cosine and Fourier sine transforms. Intuitively, Equation 9.37 says that every continuous function can be represented as the sum of sine and cosine functions.

2. (Shift theorem.) Let  $g(x)$  be a function with Fourier transform  $\tilde{g}(\omega)$  and  $s \in \mathbb{R}$  a number specifying a shift of  $g$ . The shifted version of  $g$ ,  $g_s(x) := g(x + s)$  has the Fourier transform

$$\tilde{g}_s(\omega) = \exp\{-i\omega s\} \tilde{g}(\omega) \quad (9.38)$$

# Überlagerung Gausscher Wellenpakete

Überlagerung unendlich vieler Wellen entspricht das Integral über  $\infty$  vielen Wellenlängen oder Impulse ( $p=\hbar k=h/\lambda$ ). Dies ist eine Fourier-Transformation:

$$u(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\{ikx\} dk \quad \text{mit} \quad A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u(x, 0) \exp\{-ikx\} dx.$$

Liegt als Anfangsbedingung eine Gauss-Kurve vor

$$u(x, 0) = u_0 \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2}\right\}, \quad \text{so ist} \quad A(k) = \frac{u_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2} - ikx\right\} dx = u_0 \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{b^2}{2} k^2\right\}$$

ebenfalls eine Gauss-Kurve, denn es ist  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-px^2 + qx\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \exp\left\{\frac{q^2}{4p}\right\}$ . **Wichtig!**

**Die Fouriertransformierte einer Gauss-förmigen Amplitudenverteilung mit Standardabweichung  $\sigma$  ergibt im Impulsraum wieder eine Gauss-Form, jedoch mit Standardabweichung  $1/\sigma$  !**

**So  $\sigma_x \sigma_k \geq 1$  oder  $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar$**

<http://www.itkp.uni-bonn.de/~metsch/pdm/pdmquant.html>



# Überlagerung Gausscher Wellenpakete

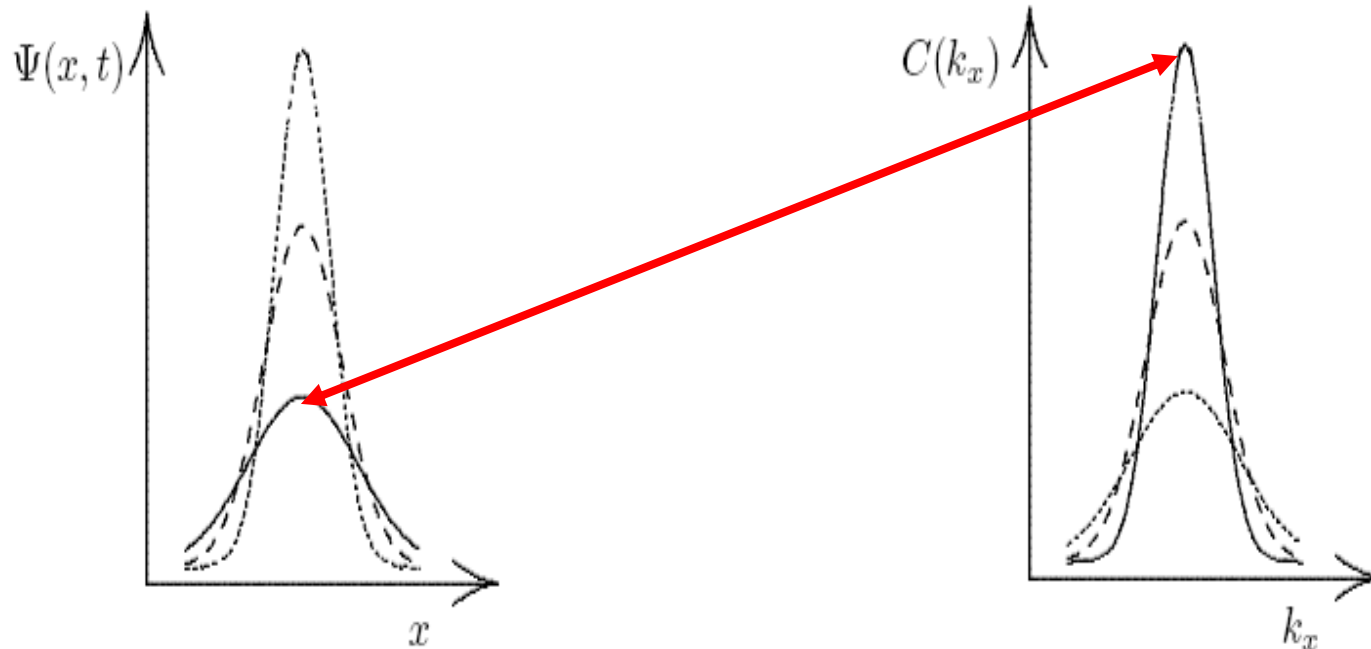


Abbildung 2.3: Korrelation zwischen dem FOURIER-Integral als Zustandsfunktion  $\Psi(x, t)$  und dem dazugehörigen FOURIER-Spektrum  $C(k_x)$ .

# Wellenpakete sind Lösungen der SG

Wellenpaket ist Superposition vieler Wellen:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) \frac{\partial e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial t} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) \frac{\partial^2 e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial x^2} dk_x \quad (2.61)$$

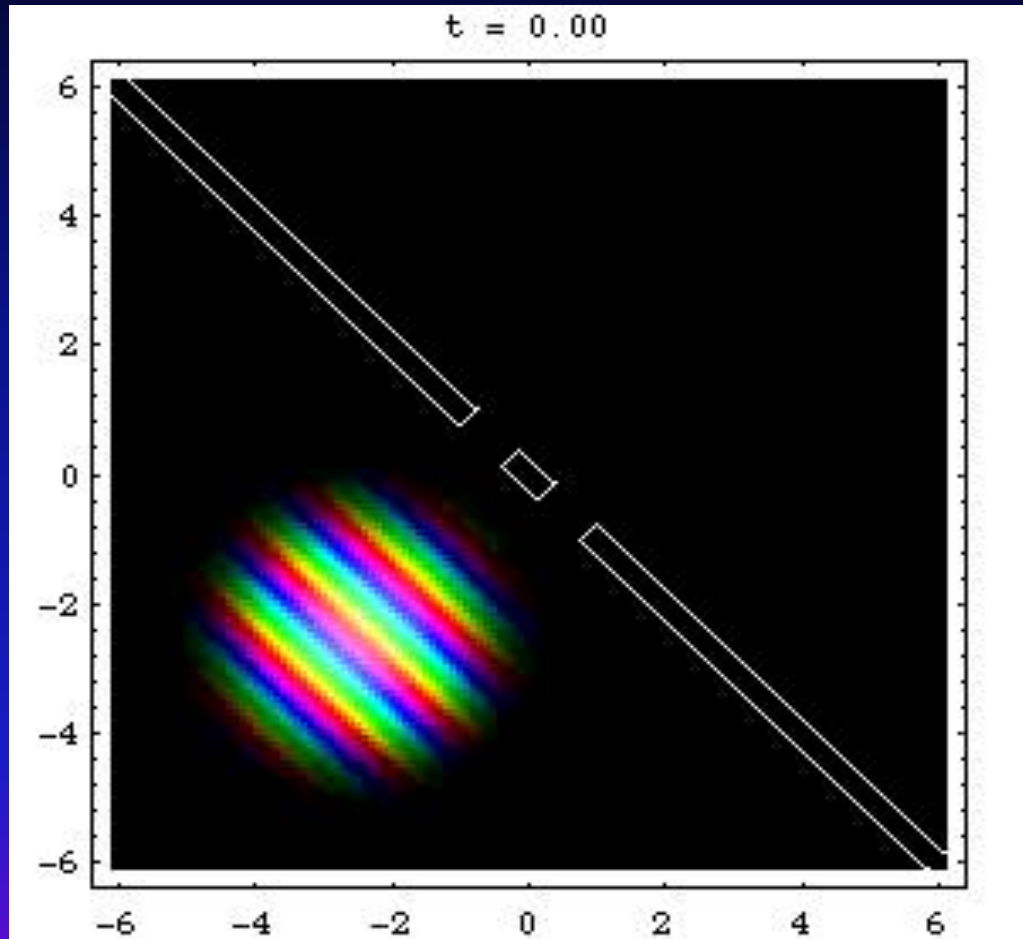
$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) (-i\omega(k_x)) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) (i^2 k_x^2) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.62)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hbar \omega(k_x) C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} \hbar \frac{\hbar k_x^2}{2m} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.63)$$

Die letzte Gleichung ist aber nur dann gültig, wenn die Bedingung  $\omega(k_x) = \hbar k_x^2 / (2m)$  erfüllt ist, da nur dann die Integranden gleich sind, q. e. d.

**Wellenpakete sind Lösung der SG und sind quadratisch integrierbar**

# Lösung der SG bei Streuung am Doppelspalt



Teil der  
Welle  
reflektiert.

Anfang:

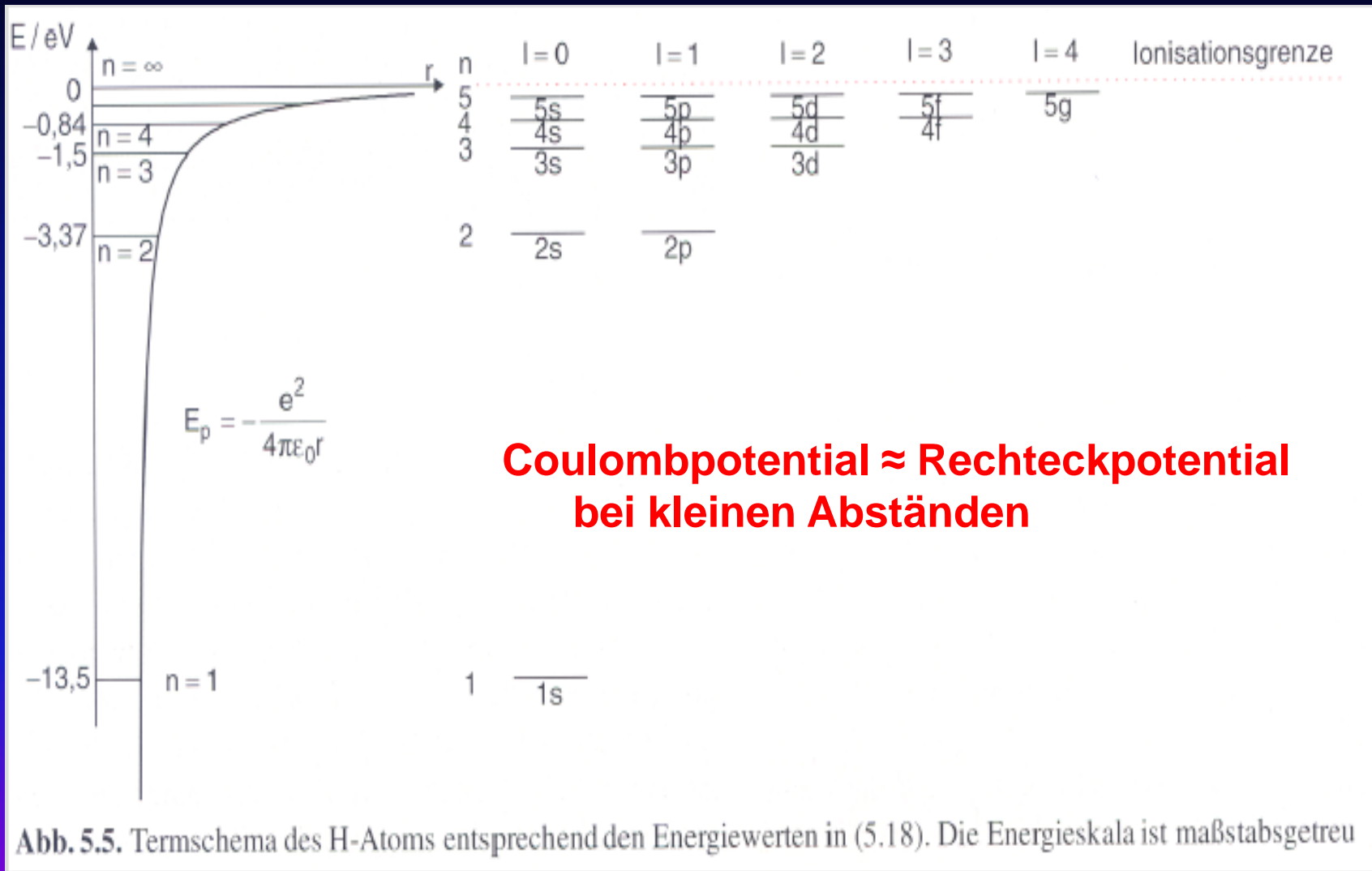
Gaussches  
Wellenpaket

---

---

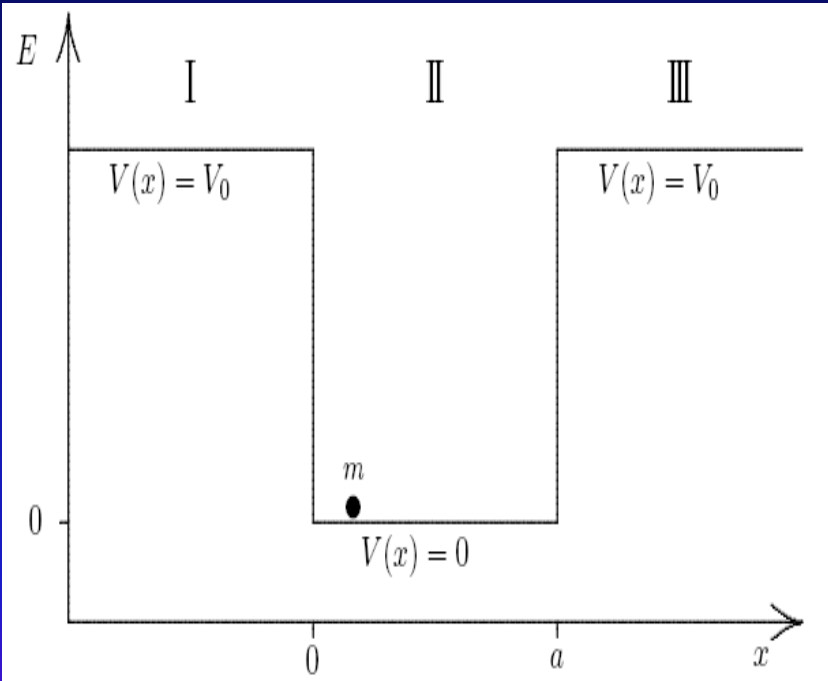
## 7.2. Lösungen der Schrödingergleichung in einem Potentialfeld

# Lösung der SG in einem externen Potentialfeld



# Lösung der SG für Teilchen in einem endlichen Potentialtopf (schwach gebundener Zustand) (I)

$$E = E_{\text{kin}} + V_0$$



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 & \text{(Bereich I)} \\ 0 & : 0 < x < a & \text{(Bereich II)} \\ V_0 & : a \leq x \leq \infty & \text{(Bereich III)} \end{cases}$$

$$E_{\text{kin}} = \begin{cases} E - V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 & \text{(Bereich I)} \\ E & : 0 < x < a & \text{(Bereich II)} \\ E - V_0 & : a \leq x \leq \infty & \text{(Bereich III)} \end{cases}$$

$$\Psi(x, t) = u(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

# Lösung der SG für Teilchen in einem endlichen Potentialtopf (schwach gebundener Zustand) (II)

**SG:**

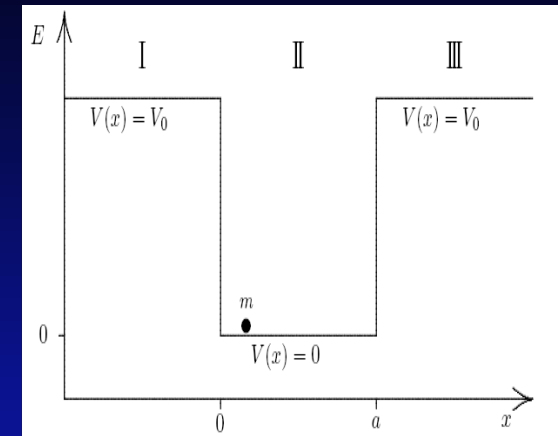
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x)$$



$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} u(x)$$

**Ansatz:**

$$\Psi(x, t) = u(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$



**Lösung für  $V=V_0$**

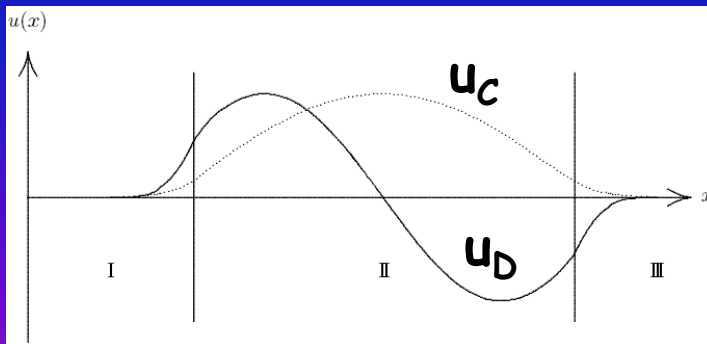
$$u_A(x) = Ae^{\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}x}$$

$$u_B(x) = Be^{-\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}x}$$

**Lösung für  $V=0$**

$$u_C(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

$$u_D(x) = D \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$



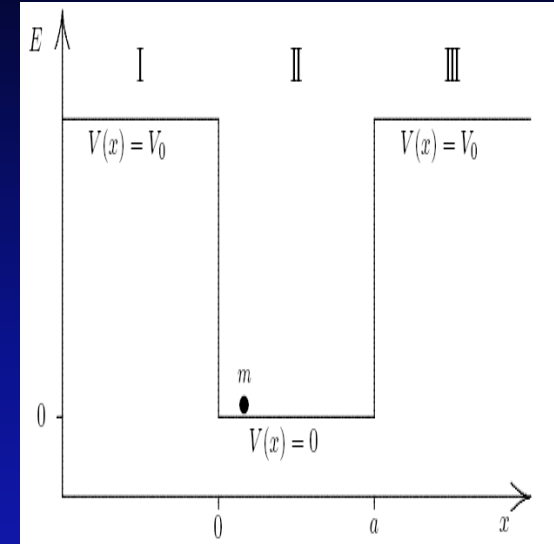
**Quadratische Integrierbarkeit verlangt  $u_A$  für  $x < 0$  und  $u_B$  für  $x > 0$ .  
Zusätzlich: Stetigkeit der Lösung ergibt gezeichnete Lösung: AW max. im Topf, aber exp. abnehmend ausserhalb  
(=Tunneleffekt, klassisch nicht erlaubt!)**

# Lösung der SG für Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf (gebundener Zustand) ( $V \Rightarrow \infty$ ) (III)

Bereich I :  $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_A(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} A e^{\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} x} = 0$

Bereich III :  $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_B(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} B e^{-\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} x} = 0$

$$u(x) = \begin{cases} 0 & : -\infty \leq x \leq 0 & \text{(Bereich I)} \\ u_C(x) + u_D(x) & : 0 < x < a & \text{(Bereich II)} \\ 0 & : a \leq x \leq \infty & \text{(Bereich III)} \end{cases}$$



**Stetigkeit der Lösung verlangt:  $u(x=0)=u(x=a)=0$  und  $u(x)=u_C(x)$**

$$u(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$$

**mit Randbedingung**

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = n\pi \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

**oder**

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

**mit**

$$u_n(x) = C \sin \frac{n\pi}{a} x$$

**Quantisierung der Energie durch Randbedingungen!**

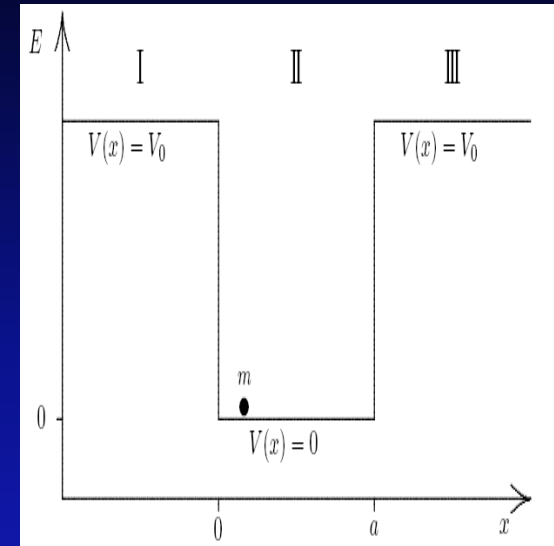


# Lösung der SG für Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf (gebundener Zustand) ( $V \Rightarrow \infty$ ) (IV)

Bereich I:  $\Psi(x, t) = 0$

Bereich II:  $\Psi_n(x, t) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$   
 $= C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} t\right)$

Bereich III:  $\Psi(x, t) = 0$



**Für  $n=0$**

$$E_0 = \pi^2 \hbar^2 0^2 / 2ma^2 = 0$$

$\Rightarrow \Psi=0$ , daher sinnlos,  
da Teilchen nicht  
vorkommt.  $\rightarrow n > 0$ ,  
d.h.  $n=1, 2, 3, \dots$

**$n=1$  entspricht  
Nullpunktenergie, die nicht  
unterschritten werden kann,  
auch bei  $T=0\text{K}$ .  
Oder Unschärferelation  $\Rightarrow$   
Nullpunktsschwingungen**

# Normierung der Wellenfunktion

Aus

$$\int_{-\infty}^0 0^2 dx + C^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx + \int_a^{\infty} 0^2 dx = 1$$

mit

$$\int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$$

folgt

$$0 + C^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{\sin 2\frac{n\pi}{a}x}{4\frac{n\pi}{a}} \right]_0^a + 0 = 1$$

$$C^2 \left( \left( \frac{a}{2} - \frac{\sin 2\frac{n\pi}{a}a}{4\frac{n\pi}{a}} \right) - (0) \right) = 1$$

$$C^2 \left( \frac{a}{2} - \frac{\sin 2n\pi}{4\frac{n\pi}{a}} \right) = 1$$

$$C^2 \left( \frac{a}{2} - \frac{0}{4\frac{n\pi}{a}} \right) = 1$$

$$C^2 \frac{a}{2} = 1$$

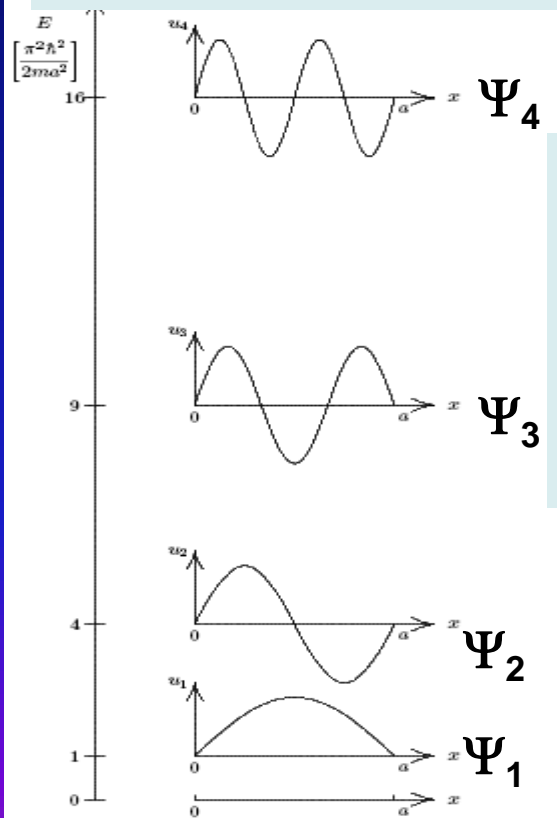
$$C^2 = \frac{2}{a}$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

## Gesamtwellenfunktion:

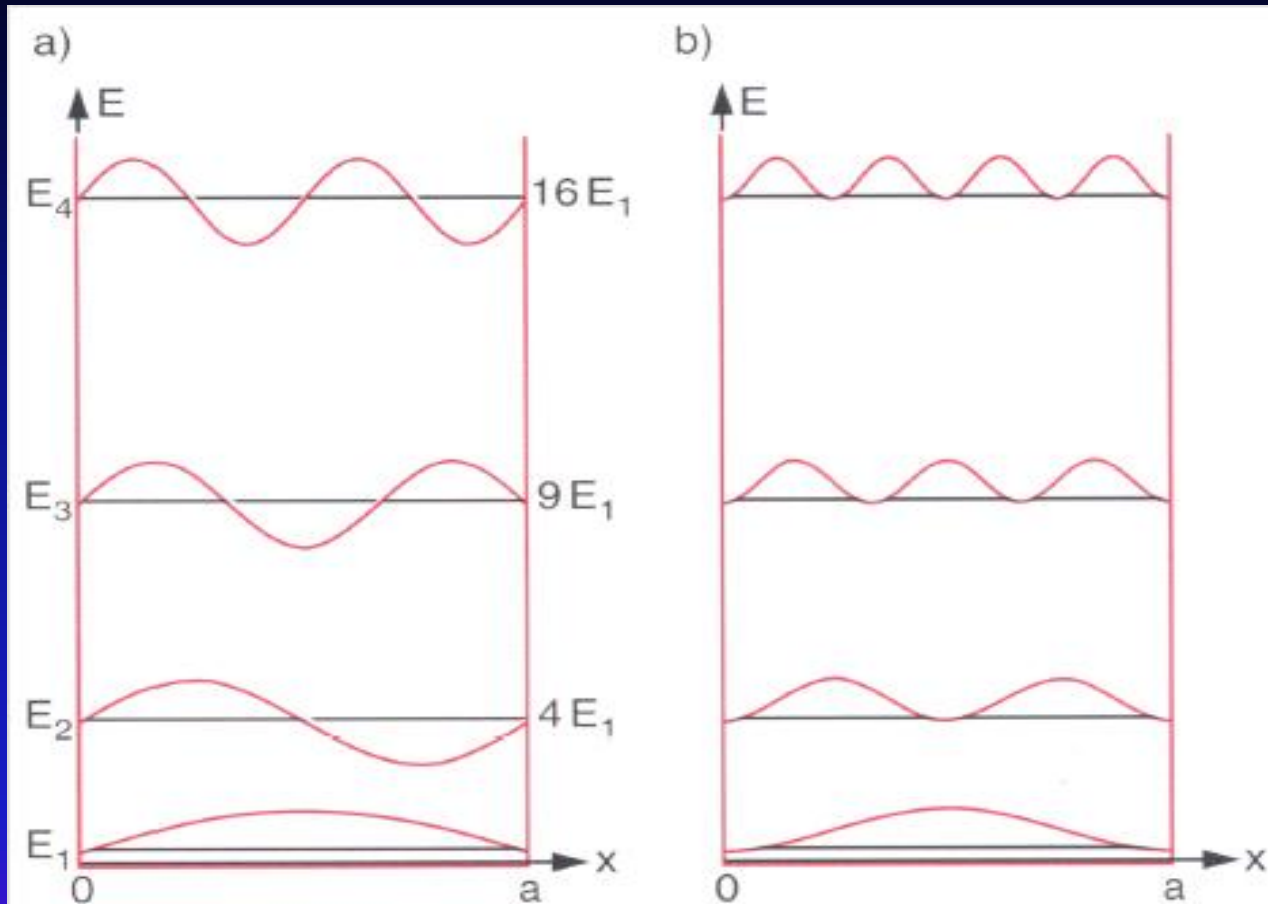
$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{i\hbar\pi^2 n^2}{2ma^2} t}$$

## Realteil $\Psi$ formt stehende Wellen



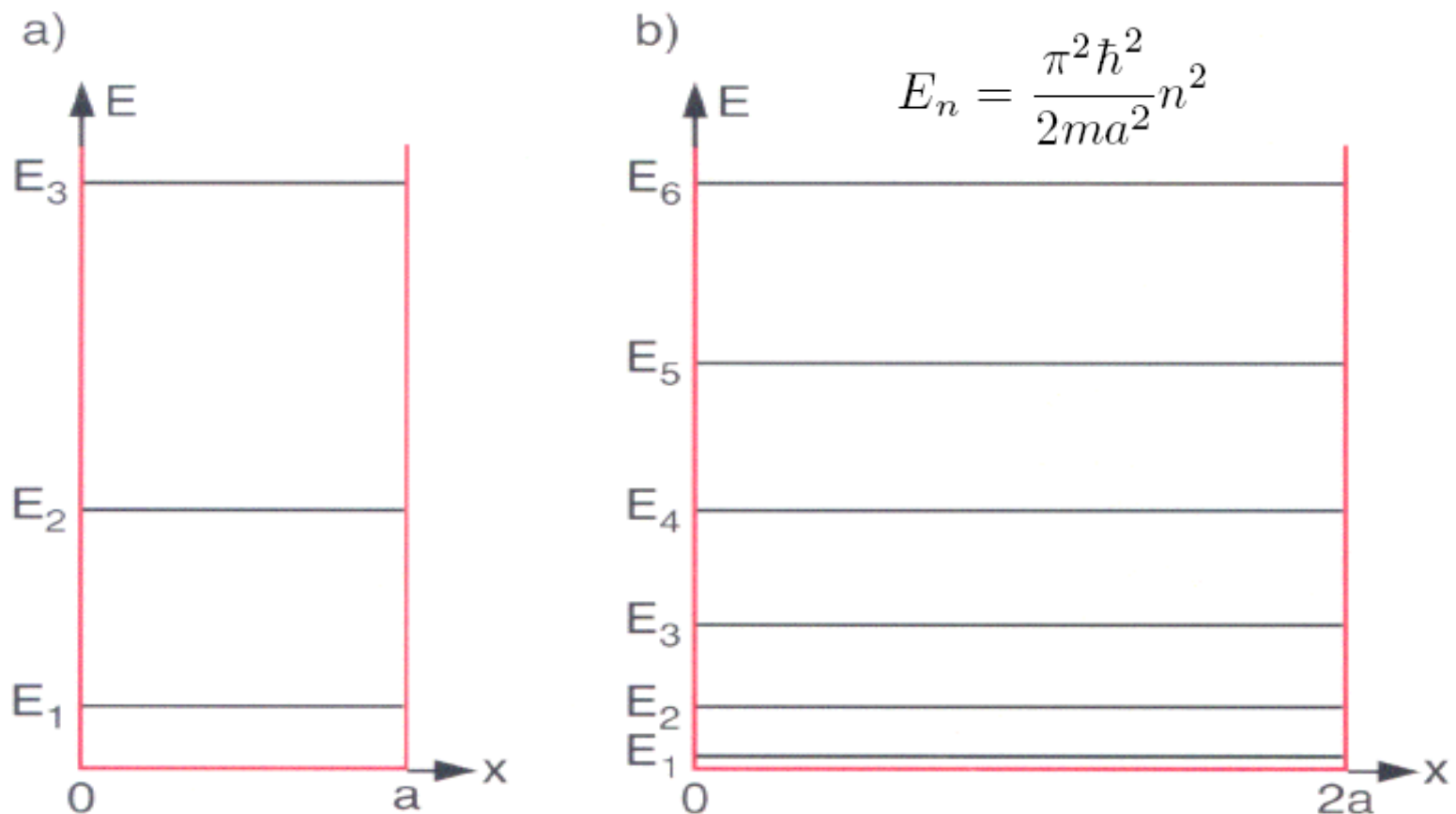
Amplitude der Wellenfkt.  $\Psi_n$  für diskrete Energieniveaus (Eigenfkt. der Energie)

# Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten



**Abb. 4.16a,b.** Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$  des Teilchens

# Erlaubte Energieniveaus in unterschiedlichen Potentialkästen



**Abb. 4.17a,b.** Vergleich der Energieniveaus in einem eindimensionalen unendlich hohen Potentialkasten der Breite (a)  $\Delta x = a$ , (b)  $\Delta x = 2a$

# Korrespondenzprinzip: QM $\Rightarrow$ KM für makroskopische Systeme

In Übereinstimmung mit der klassischen Vorstellung sind die beiden Bereiche I und III mit unendlich hohem Potential für das Teilchen absolut tabu.

Im Gegensatz zu den klassischen Vorstellungen gilt aber zweierlei:

1. Das Teilchen kann im gebundenen Zustand nicht beliebige Energiebeträge aufnehmen; es sind gemäß  $n = 1, 2, 3, \dots$  nur bestimmte, scharfe Energiewerte erlaubt.
2. Es existiert eine **Nullpunktsenergie** bei  $n = 1$ , die nicht unterschritten werden kann, d. h., das Teilchen hat diese Energie auch beim absoluten Nullpunkt der Temperatur ( $T = 0$  K) und kann (in Übereinstimmung mit HEISENBERG) damit natürlich niemals in Ruhe sein.

Der Abstand zwischen den erlaubten Energieniveaus  $E_n$  ist um so kleiner,

- je größer die Masse  $m$  und
- je größer der dem Teilchen zugestandene Raum, d. h. je größer die Topflänge  $a$  ist.

Das bedeutet, daß bei makroskopischen Körpern und/oder bei makroskopisch großen Potentialtöpfen (z. B. ein Gasbehälter mit einem Teilchen darin) die Energieniveaus so dicht aneinanderrücken, daß das quantenmechanische Ergebnis in das (scheinbare) Energiekontinuum der klassischen Mechanik übergeht.

**Dies ist das Korrespondenzprinzip**

# Erwartungswert von x

Für den Erwartungswert  $\langle x \rangle$  gilt folgende Rechnung:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.35)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0x0 dx \\ &+ \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} dx \\ &+ \int_a^{+\infty} 0x0 dx \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\langle x \rangle = 0 + \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + 0 \quad (3.38)$$

# Erwartungswert von x

Mit der trigonometrischen Umformung  $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$  folgt aus Gleichung (3.38)

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \frac{1}{2} \int_0^a x \left[ 1 - \cos 2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) \right] dx \quad (3.39)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a \left( x - x \cos \frac{2n\pi}{a} x \right) dx. \quad (3.40)$$

In Integraltabellen findet man  $\int x \cos bx dx = \frac{\cos bx}{b^2} + \frac{x \sin bx}{b}$ . Damit läßt sich Gleichung (3.40) weiter vereinfachen:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{2} x^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{x \sin \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{2n\pi}{a}} \right]_0^a \quad (3.41)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{2} a^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{a \sin \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{2n\pi}{a}} - \frac{1}{2} 0^2 + \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + \frac{0 \sin \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{2n\pi}{a}} \right] \quad (3.42)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{2} a^2 - \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - 0 - 0 + \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + 0 \right] \quad (3.43)$$

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad (3.44)$$

**Die Erwartung ist, dass der Mittelwert von x in der Topfmitte ist**

# Erwartungswert von $p_x$ (1)

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.45)$$

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \\ &+ \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \right) dx \\ &+ \int_a^{+\infty} 0 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 - i\hbar \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left( \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx + 0 \quad (3.48)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left( \frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \quad (3.49)$$



## Erwartungswert von $p_x$ (2)

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (3.50)$$

In Integraltabellen findet man  $\int \sin ax \cdot \cos ax dx = \frac{1}{2a} \sin^2 ax$ , daraus folgt:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \left[ \frac{1}{2\frac{n\pi}{a}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \quad (3.51)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{1}{a} \left( \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}a\right) - \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \right) \quad (3.52)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} (\sin^2(n\pi) - 0) \quad (3.53)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} 0 \quad (3.54)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (3.55)$$

**Die Erwartung ist, dass der Mittelwert von  $p_x$  0 ist, d.h. Teilchen hat mit gleicher Wahrscheinlichkeit einen Impuls nach links oder nach rechts.**

# Zum Mitnehmen

---

---

**Die Wellenfunktion eines Teilchens gehorcht der Schrödingergleichung**

**Klassische Zustände sind immer Überlagerungen von vielen Eigenzuständen, die durch Interferenz zu Wellenpaketen führen.**

**Auch Wellenpakete gehorchen der SG**

**Die Randbedingungen der SG führen zur Quantisierung der Energien der Teilchen**

**Es gibt eine niedrigste Energie für jedes Quantensystem  $\neq 0$ , weil ansonsten die Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0 wird. Dies entspricht eine Impulsunschärfe und dementsprechend eine Ortsunschärfe  $\Rightarrow$  Nullpunktsschwingungen (auch bei absoluter Temp. = 0!)**