

Quantenmechanik

Eine Einführung in die theoretischen
Grundlagen

Zusammenfassung

Fachgebiet Physik



erarbeitet von: Robert Bröckling

Fachbereich: Physik

© 2011



Vorwort

Vorwort

Robert Bröckling

Paderborn, 26. Februar 2011

Zum Umgang mit diesem Skript

Dieses Skript ist für Studenten der Naturwissenschaften geschrieben. Die Verwendung dieses Skriptes für Schülerinnen und Schülern der Oberstufe ist aufgrund der mangelnden mathematischen Fähigkeiten nur bedingt möglich.

Dies gilt es noch nachzubessern:

Todo list

Bohr noch beenden...	10
weiter nach „Wir„ und so gucken.	21
Ausarbeitung des Themas Rechteckpotentiale	25
Ausarbeitung des Themas Statistische Deutung	30
Asymptote Test	30
Ausarbeitung: Klassische Näherung und WKB-Methode	31
Ausarbeitung des Themas Klassische Näherung und WKB-Methode	32
Ausarbeitung des Themas Formalismus/Mathematischer Rahmen	33



Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Das Atom und sein Aufbau	2
1.1.1. Der Atomkern	2
1.1.2. Die Atomhülle	2
1.1.3. Masse eines Atoms	3
1.1.4. Größenverhältnisse eines Atoms	3
1.2. Ältere Quantentheorie	4
1.2.1. Das Wasserstoffspektrum	4
1.2.2. Eine neue Theorie	5
1.2.3. Das Bohrsche Atommodell	6
2. Materiewellen	11
2.1. Freies Wellenpaket, Phasen und Gruppengeschwindigkeit	11
3. Die Schrödingergleichung	14
3.1. Operatoren	15
3.2. Wellengleichung für ein freies Teilchen	17
3.3. Teilchen in einem skalaren Potential	18
3.4. Teilchen in einem elektromagnetischen Feld	20
3.5. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	20
3.5.1. Eigenschaften der zeitunabhängigen Schrödingergleichung und Art des Energiespektrums	21
3.6. Zusammenfassung	21
4. Eindimensionale Quantensysteme	23
4.1. Rechteckpotentiale	24
4.1.1. Potentialstufe, Reflexion und Transmission	25
5. Statistische Deutung des Welle-Teilchen-Dualismus und Unschärferelation	30
6. Formalismus und Deutung der Wellenmechanik	31



7. Klassische Näherung und WKB-Methode	32
8. Allgemeiner Formalismus der Quantentheorie/Mathematischer Rahmen	33
Literaturverzeichnis	34
A. Anhang	i
A.1. Mathematischer Anhang	ii
A.1.1. Formelsammlung	ii
Abkürzungsverzeichnis	iii
Abbildungsverzeichnis	iv
Tabellenverzeichnis	v



1. Einleitung

Das Wort *Atom* kommt aus dem Griechischen und bedeutet das *Unzerscheidbare*, den kleinsten Baustein der Materie, den man nicht weiter teilen kann. Im 5. und 4. vorchristlichem Jahrhundert wurde dieser Begriff durch die Naturphilosophen *Demokrit* (460-370 v.Chr.), *Platon* (429-348 v.Chr.) und *Aristoteles* (384-322 v.Chr.) geprägt. Mehr als 2 Jahrtausende später wurde aus der spekulativen Atomistik eine im heutigen Sinne exakte Wissenschaft, die Atomphysik. Ins Lateinische übersetzt bedeutet Atom *Individuum*, kleinste Einheit einer Menge, die noch alle für diese Menge wesentlichen Eigenschaften besitzt. Man kann zwar ein Atom weiter in Protonen, Neutronen und Elektronen zerlegen, doch die Eigenschaften des Atoms werden dadurch zerstört.

Die **Atomistik der Materie** folgte aus chemischen Untersuchungen. Das *Gesetz der konstanten und multiplen Proportionen* formulierten etwa 1799 *Joseph-Louis Proust* (*26. September 1754 in Angers; †5. Juli 1826 ebenda) und 1803 *John Dalton* (*6. September 1766 in Eaglesfield, Cumberland; †27. Juli 1844 in Manchester). Es besagt, dass die Massenanteile der Elemente in chemischen Verbindungen gleicher Elemente in einem ganzzahligen Verhältnis stehen, es können nur „ganze„ Atome miteinander reagieren. Dies stützte die damals sehr umstrittene Atomhypothese.

Das erste **Atommodell** von *William Prout* (*15. Januar 1785 in Horton (Gloucestershire); †9. April 1850 in London) wurde 1815 aufgestellt und nimmt an, dass die Atome aller Elemente aus Wasserstoff (H)-Atomen zusammengesetzt sind. Dies führte zu den ersten *Periodensystemen der Elemente* von *Julius Lothar von Meyer* (*19. August 1830 in Varel, Oldenburg; †11. April 1895 in Tübingen) und *Dmitri Iwanowitsch Mendelejew* (*8. Februar 1834 in Tobolsk, Russland; †2. Februar 1907 in Sankt Petersburg), dessen Ordnungsschemata auf dieser Annahme beruhen.

Von 1900 - 1930 entwickelten Forscher wie *Niels Henrik David Bohr* (*7. Oktober 1885 in Kopenhagen; †18. November 1962 ebenda), *Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld* (*5. Dezember 1868 in Königsberg, Ostpreußen; †26. April 1951 in München), *Max Born*, *Erwin Schrödinger*, *Wolfgang Pauli* und *Paul Dirac* eine völlig neue Beschreibung des Aufbaus von Atomen die vollständig von der *Quantentheorie* bzw. *Quantenmechanik* bestimmt wird.



1.1. Das Atom und sein Aufbau

Ein Atom ist der kleinste, unveränderliche Bestandteil eines chemischen Elementes, das sich durch chemische Prozesse bei mäßigen Temperaturen nur geringfügig, nämlich in ihren Ionisierungsgrad, verändern lassen. Mäßige Temperaturen heißt hier:

$$kT \approx 0..100eV \quad (1.1)$$

Dies bedeutet, dass das Energieäquivalent kT der Temperatur T nicht größer als einige Elektronenvolt [eV] ist. Atome bestehen aus einem *Atomkern* und einer *Atomhülle*, wo sich Elektronen e^- befinden.

1.1.1. Der Atomkern

Der Atomkern besteht aus Protonen p^+ und Neutronen n^0 . Die Anzahl der Protonen wird als *Ordnungszahl* Z bezeichnet. Die *Massenzahl* A ist die Summe aus Protonen und Neutronen im Kern. Die Ordnungszahl ist spezifisch für ein Element, d.h. es gibt kein anderes Element mit der selben Ordnungszahl Z . Ein Element mit gleicher Ordnungszahl Z aber unterschiedlicher Massenzahl A nennt man *Isotop*. Es besitzt die selben chemischen Eigenschaften, wie die anderen Isotope bzw. das "original," Element, sind also unter normalen Bedingungen chemisch kaum unterscheidbar. Ein Element E wird wie folgt angegeben:



1.1.2. Die Atomhülle

In der Atomhülle befinden sich bei einem neutralen Element genau so viele Elektronen e^- , wie Protonen p^+ im Kern. Weicht die Anzahl der Elektronen in der Hülle von der Zahl der Protonen im Kern ab, so bezeichnet man das Atom als *Ion*. Ist die Anzahl der Elektronen geringer als die Anzahl der Protonen, so handelt es sich, durch die positive Ladung der Protonen um ein positiv geladenes Ion. Ist die Anzahl der Elektronen größer als die der Protonen, so handelt es sich um ein negativ geladenes Ion. Die Ladung eines Ions wird mit einem "+" oder "-" hochgestellt hinter dem Elementsymbol angegeben. Es sind auch mehrfach geladene Ionen möglich.





Beispiele: ${}^1_6\text{C}^+$; ${}^{34}_{17}\text{Cl}^-$; ${}^{16}_8\text{O}^{2-}$

In der Chemie wird auf die Angabe von Massenzahl und Ordnungszahl meist verzichtet; wichtiger ist die Angabe der Ladung bzw. Ionisierung.

1.1.3. Masse eines Atoms

Ein Elektron wiegt nur $1/1836$ eines Protons, trägt also vernachlässigbar gering zur Masse eines Atoms bei. Die gesamte Masse eines Atoms befindet sich also im Kern. Proton und Neutron wiegen ungefähr gleich. Die *Atomare Masseneinheit* u (von engl. Unit) ist definiert als $1/12$ der Masse m des neutralen Kohlenstoffisotops ${}^{12}_6\text{C}$.

$$1u = 1/12 m \left({}^{12}_6\text{C} \right) \quad (1.4)$$

Ein *Mol* ist nach *Avogadro* so viel Gramm, wie das relative Atomgewicht angibt.

$$\text{Masse eines Atoms} = \frac{\text{Masse von 1 Mol der Substanz}}{N_A} \quad (1.5)$$

N_A ist hier die **Avogadrokonstante** und gibt an, wie viele Atome bzw. Moleküle in einem Mol der Substanz vorhanden sind. In der deutschsprachigen Literatur, wird N_A oft als **Lohschmidt-Zahl** N_L bezeichnet. Es gilt:

$$N_A = N_L = (6,022045 \pm 0,000005) \cdot 10^{23} \text{ Mol}^{-1} \quad (1.6)$$

In der Natur vorkommende Substanzen sind oft Gemische von Isotopen. So kommt das Chlor-Isotop ${}^{35}_{17}\text{Cl}$ mit einer Häufigkeit von 75,4% und das Isotop ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ mit einer Häufigkeit von 24,6% vor. Die Atommasse dieses Isotopengemisches beträgt also 35,453. In Periodensystemen wird, aus praktischen Gründen, dieser Wert angegeben.

1.1.4. Größenverhältnisse eines Atoms

Der Kernradius R eines Elements mit der Massenzahl A beträgt:

$$R = (1,3 \pm 0,1)A^{1/3} \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (1.7)$$

Die Größe von Atomen lässt sich mit Hilfe von verschiedenen Methoden bestimmen. Die Größe von Atomen hängt stark vom Ionisierungsgrad und der Zahl der Elektro-



1. Einleitung

nen ab. Ergebnisse aus verschiedenen Methoden für Edelgase finden sich in Tabelle 1.1.

Element	aus der Zähigkeit	aus Netzebenenabstand	aus Kovolumen
Neon	0,118	0,160	0,120
Argon	0,144	0,190	0,148
Krypton	0,158	0,197	0,158
Xenon	0,175	0,220	0,172

Tabelle 1.1.: Atomradien in nm einiger Edelgase

Die Verhältnis von Kernradius und Atomradius ist bei den Edelgasen in etwa 1 : 100000. Der Kernradius ist also etwa 100000 mal kleiner als der Atomradius; ein Atom besteht also im wesentlichen aus leerem Raum. Wenn der Atomkern die Größe einer Kirsche hätte, wäre das Atom insgesamt so groß wie der Kölner Dom.

1.2. Ältere Quantentheorie

Aus chemischen und physikalischen Untersuchungen entstand das Thomsonsche Atommodell. Es besagt, dass ein Atom aus in positiven Ladungen eingebetteten negativen Ladungen besteht. Dies konnte den Aufbau der Materie zunächst ausreichend beschreiben. *Rutherford* entdeckte jedoch in seinem berühmten Streuversuch, dass ein Atom aus einem kleinen Kern, in dem sich die gesamte Masse konzentrierte und einer großen umgebenen Hülle, wo sich die Elektronen befinden, besteht. Die Schwäche des Thomsonschen Atommodells zeigte sich aber vor allem in der Deutung spektroskopischer Untersuchungen. Diese ergaben ein für jedes Element spezifisches Spektrum. Jedes angeregte Atom sendet Licht in wohldefinierten Wellenlängen aus. Das Thomsonsche Atommodell konnte dies jedoch nicht erklären. Mit der Entwicklung der Quantentheorie seit 1900 standen den Physikern jedoch neue Methoden und Betrachtungsweisen zur Verfügung. Niels Bohr entwickelte, beruhend auf dieser neuen Theorie, ein völlig neuartiges Modell des Aufbaus von Atomen. Dieses Modell erwies sich besonders effektiv bei der Berechnung des Wasserstoffspektrums. Arnold Sommerfeld verfeinerte dieses Modell noch weiter.

1.2.1. Das Wasserstoffspektrum

Ein angeregtes Wasserstoffatom sendet Licht verschiedener Wellenlängen aus. Im sichtbaren Bereich sind dies 656,3nm, 486,1nm und 434,0nm und weiter. Die stärks-



1. Einleitung

te Linie bei $656,3\text{nm}$ wurde bereits 1853 von *Ångstrom* entdeckt. *Balmer* fand 1885 eine Formel, welche diese Serie von Linien beschreiben konnte.

$$\lambda = \frac{n_1^2}{n_1^2 - 4} G \quad (1.8)$$

Dabei ist $n_1 = 3, 4, \dots$ und G ein empirischer Zahlenwert. Der Abstand der Linien wird mit steigendem n_1 immer geringer. Heute schreiben wir nach Bohr die Balmerformel etwas anders.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > 2, \text{ ganzzahlig} \quad (1.9)$$

Die Größe $R_H = 4/G$ heißt *Rydberg-Konstante* für das Wasserstoffatom und hat den Zahlenwert

$$R_H = 109677,5810 \text{ cm}^{-1} \quad (1.10)$$

Für $n \rightarrow \infty$ folgt eine Grenzwellenlänge (Seriengrenze):

$$\bar{\nu}_\infty = R_H \cdot \frac{1}{4} \quad (1.11)$$

Für die Balmer Serie folgt so eine Grenzwellenlänge von $490,5\text{nm}$.

Das gesamte Spektrum des Wasserstoffatoms besteht aus mehreren solcher Serien, die teilweise Wellenlängen aufweisen, welche nicht im sichtbaren Bereich liegen. Die Formel für die Berechnung der Wellenlängen dieser Serien (jeweils $n' = \text{konstant}$) lautet:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n' < n, \text{ ganzzahlig} \quad (1.12)$$

1.2.2. Eine neue Theorie

Gegen Ende des 19. und zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde die Physik neu gestaltet. Die Formulierung der Relativitätstheorie von Albert Einstein (1915) erforderte ein Überdenken und eine Neuformulierung der Gesetze der Klassischen Mechanik im Bereich großer Maßstäbe, hoher Geschwindigkeiten und großer Massen. Im Bereich des sehr Kleinen forderten die Erkenntnisse von Max Planck über die Quantisierung von Energie eine Formulierung der Physik, welche diese Quanten mit den Beobachtungen in einer Theorie in Einklang bringen vermochte.



1. Einleitung

Um eine solche Theorie zu entwickeln wurden einige Postulate aufgestellt, auf dessen Grundlage eine Theorie aufzubauen war.

- Systeme materieller Teilchen folgen den Gesetzen der klassischen Mechanik
- Es wird postuliert, dass von allen Lösungen der Bewegungsgleichungen nur die übrig bleiben, welche bestimmten *ad hoc* eingeführten Quantisierungsregeln genügen

Betrachtet man das einfachste Atom, bestehend aus nur einem Proton im Kern und einem Elektron, ein Wasserstoffatom, so sei E_1, \dots, E_n die Folge der quantisierten Energien. Die Energie ist eine stetige Funktion der Quantenzahl n

$$E_n = E(n).$$

Die Quantelung der Energie ergibt sich dann daraus, dass n nur ganzzahlige Werte annehmen kann.

Das Korrespondenzprinzip, welches hier einen Übergang von quantentheoretisch berechneten Größen zu klassisch berechneten Größen für großes n fordert, liefert folgende Beziehung zwischen der Klassischen- und der Quantenfrequenz:

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \nu_{cl}(E) \quad (1.13)$$

Daraus ergibt sich die Quantisierungsregel für große n :

$$\int^E \frac{dE}{\nu_{cl}(E)} = nh + C \quad (1.14)$$

Auf alle Werte von n ausgedehnt setzt man $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ und erhält

$$\int_{E_{min}}^E \frac{dE}{\nu_{cl}(E)} = nh. \quad (1.15)$$

Für das H-Atom ergeben sich genau die Terme der Balmer-Formel, welche empirisch bestimmt und in zahllosen Versuchen bestätigt worden sind.

1.2.3. Das Bohrsche Atommodell

An dieser Stelle soll nur ein Abriss der Bohrschen Theorie des Wasserstoffatoms gegeben werden. Zum umfassenden Studium des Bohrschen Atommodells verweise ich auf diverse Fachliteratur, z.B. [Haken und Wolf \[2000\]](#) und [Landau \[1967b\]](#). Zum



1. Einleitung

Verständnis der Quantentheorie und der Quantenmechanik tragen jedoch die Grundgedanken von Bohr erheblich bei, sodass zumindest ein Einstieg in dieses Thema an dieser Stelle lohnt.

Ein entscheidender Ansatz, den Atombau mit den Frequenzen der Spektrallinien in Einklang zu bringen stammt von *Niel Bohr (1913)*. Ähnlich wie Rutherford nahm er an, dass sich die Elektronen auf Kreisbahnen um den Kern bewegen. Coulombkraft und Zentrifugalkraft sind also im dynamischen Gleichgewicht. Für das Wasserstoffatom gilt dann

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_0 r \omega^2. \quad (1.16)$$

Die zugehörige Energie ergibt sich aus der potentiellen und kinetischen Energie. Die kinetische Energie ergibt sich zu $m_0 v^2/2$ oder $m_0 r^2 \omega^2/2$. Die potentielle Energie ist durch die Überführungsenergie gegeben, die man gewinnt, wenn man ein Elektron aus dem Unendlichen unter der Einwirkung der Coulombkraft auf den Abstand r vom Kern bringt. Es gilt:

$$E_{pot} = \int_{\infty}^r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r'^2} dr' = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.17)$$

Daraus folgt für die gesamte Energie

$$E = \frac{1}{2} m_0 r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (1.18)$$

Einsetzen von Gleichung 1.16 formt diese Gleichung noch einmal um:

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2(4\pi\epsilon_0)^{2/3}} \left(e^4 m_0 \omega^2 \right)^{1/3} \quad (1.19)$$

Soweit entspricht dieses Modell dem von Rutherford. Versucht man jedoch die Emission und Absorption von Licht mit den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik zu verstehen stößt man auf grundlegende Probleme:

- Klassisch sind Bahnen mit beliebigen Radien möglich. Dies lässt jedoch ein kontinuierliches Spektrum entstehen, da ja alle Übergänge zwischen beliebigen Bahnen mit verschiedenen Radien möglich sind.
- Elektronen auf Kreisbahnen sind beschleunigte Ladungen. Diese geben wie ein Hertzscher Oszillator elektromagnetische Strahlung ihrer Umlauffrequenz $\nu = \omega/2\pi$ ab und verlieren Energie, müssten also auf Spiralbahnen in den



1. Einleitung

Kern stürzen. Die Umlauffrequenz ändert sich dabei kontinuierlich und das Spektrum der ausgesandten Strahlung ist kontinuierlich.

Bohr stellte, um diese Diskrepanz zu vermeiden Postulate auf, die ein vom klassischen Verhalten von Elektronen abweichendes Verhalten für Elektronen in Atomen fordern:

- Die klassischen Bewegungsgleichungen für Elektronen sollen weiterhin gelten. Es sollen jedoch nur bestimmte diskrete Bahnen mit der Energie E_n erlaubt sein. Dies sind die Energieterme eines Atoms.
- Die Bewegung auf diesen gequantelten Bahnen erfolgt strahlungslos. Die Frequenz der emittierten bzw. absorbierten Strahlung ergibt sich aus dem Energieunterschied der jeweiligen Bahnen:

$$E_n - E'_n = h\nu \quad (1.20)$$

Die Energieterme identifizierte Bohr als

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}; E'_n = -\frac{Rhc}{n'^2}. \quad (1.21)$$

Das Minuszeichen bedeutet dabei, dass es sich um Bindungsenergien handelt. Beim Übergang von Elektronen von höheren Bahnen auf niedrigere Bahnen wird also Energie frei, beim Übergang von Elektronen von niedrigeren Bahnen auf höhere Bahnen wird Energie hinzugefügt/absorbiert.

- Für die Berechnung der Rydbergkonstanten R in Gleichung 1.21 verglich Bohr die Umlauffrequenz der Elektronen auf den Bahnen mit der emittierten bzw. absorbierten Strahlung. Diese müssten nach der klassischen Theorie gleich sein. Für kleine Bahnradien trifft dies jedoch für Wasserstoffatome in keinsten Weise zu.¹

Ein entscheidender Gedanke Bohrs war nun die Beachtung des Korrespondenzprinzips. Dies fordert einen Übergang der Gesetze der Atomphysik in die Gesetze der klassischen Physik für große Bahnenradien r . Man betrachtet die Lichtaussendung eines Elektrons beim Übergang von einer Bahn mit der Quantenzahl n auf eine kleinere mit der Quantenzahl n' . Dieser Übergang soll den beiden ersten Postulaten genügen. Die Frequenz ν mit $(n - n') = \tau$ ergibt sich nach Gleichung 1.12:

¹vgl. Haken und Wolf [2000] S.105-106

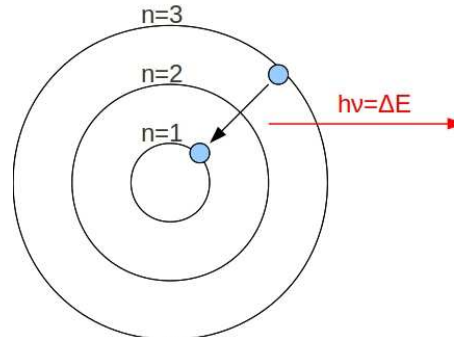


1. Einleitung

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.22)$$

$$= Rc \left(\frac{1}{(n - \tau)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.23)$$

$$\approx Rc \frac{2\tau}{n^3} \quad (1.24)$$



Im Fall großer n oder mit $\tau = 1$ ergibt sich

$$\nu = \frac{2Rc}{n^3}. \quad (1.25)$$

Abbildung 1.1.: Bahnen und Übergänge im Bohrschen Atommodell

Diese Frequenz kann man nun mit der klassischen Umlauffrequenz $\omega/2\pi$ gleichsetzen. Es ergibt sich

$$\omega = \frac{4\pi Rc}{n^3}. \quad (1.26)$$

Nun kann man die Gleichung für die Energieterme 1.21 mit der Gleichung für die Energie 1.19 gleichsetzen und für ω nach Gleichung 1.26 $\frac{4\pi Rc}{n^3}$ einsetzen. Nach einer längeren aber einfachen Rechnung ergibt sich für R :

$$\begin{aligned} \frac{Rhc}{n^2} &= \frac{1}{2(4\pi\epsilon_0)^{2/3}} \left[e^4 m_0 \left(\frac{4\pi Rc}{n^3} \right)^2 \right]^{1/3} \\ R &= \frac{m_0 e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Für die Rydbergkonstante R_∞ folgt daraus der Zahlenwert

$$R_\infty = (109737,318 \pm 0,012) \text{ cm}^{-1} \quad (1.28)$$

Der Radius der n -ten errechnet sich mit den obigen Ergebnissen zu

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{e^2 m_0}. \quad (1.29)$$

Die hier auftretende Quantenzahl n heißt *Hauptquantenzahl*.



1. Einleitung

Für den *Bahn-Drehimpuls* $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ ergibt für das Elektron auf der n -ten Bahn, mit Radius r_n und der Umlauffrequenz $\omega/2\pi$ die Quantenbedingung

$$|l| = m_0 v_n r_n = m_0 r_n^2 \omega_n = n \hbar \quad ; n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.30)$$

Wesentliches Charakteristikum der Bohrschen Postulate ist:

- Sie machen keine Aussagen über Vorgänge, sondern über Zustände.
- Der klassische Bahnbegriff wird aufgegeben.
- Es wird nicht nach dem zeitlich Verlauf gefragt, sondern nach den stationären Anfangs- bzw. Endzuständen.

Bohr noch
beenden...

Im vorangehenden Kapitel 1.2.2 wurden bereits die Quantisierungsregeln nach Bohr und Sommerfeld angesprochen. Auf periodische Systeme mit nur einem Freiheitsgrad können diese regeln in gleicher Weise angewandt werden. Zunächst wird die Regel in eine verallgemeinerte Form gebracht. q sei die Lagekoordinate, p der konjugierte Impuls und $H(p, q) = E$ die Gesamtenergie. Der Phasenraum ist zweidimensional und die periodischen Bewegungen werden durch geschlossene Kurven $H(q, p) = const.$ dargestellt. Mit Hilfe der Hamiltonschen Gleichungen kann man zeigen, dass

$$\int_{E_{min}}^E \frac{dE}{\nu(E)} = \oint_{H=E} p dq \quad (1.31)$$

ist, wobei das Zeichen $\oint_{H=E} p dq$ bedeutet, dass das Integral über eine volle Periode der Bewegung mit der Energie E zu nehmen ist (Wirkungsintegral).



2. Materiewellen

Die Doppelnatur des Lichts - Welle und Teilchen - ist im Zusammenhang mit dem Auftreten von Quanten besonders frappierend. Angenommen, auch Materie würde diese Dualität zeigen. Jedem Teilchen wird also, wie jedem Photon eine elektromagnetische Welle, eine Welle mit der Frequenz ω und der Energie E zugeordnet. Es gilt dann die Einsteinsche Beziehung

$$E = \hbar\omega. \quad (2.1)$$

Das Atom ist demnach ein Hohlraumresonator mit diskreter Folge von Eigenfrequenzen und es erklärt sich die Quantisierung seiner Energieniveaus. Dies legt die Vermutung nahe, dass es sich bei Materie und Strahlung um Varianten ein und des selben Objekttyps mit gleichzeitig wellenartigen und korpuskularen Eigenschaften handelt.

2.1. Freies Wellenpaket, Phasen und Gruppengeschwindigkeit

Wir betrachten die Ausbreitung einer elektromagnetischen Wellen in einem homogenen und isotropen Medium. Der einfachste Typ einer Welle ist die ebene, monochromatische Welle

$$\varphi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}. \quad (2.2)$$

Der Term beschreibt eine Schwingung mit der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, die sich mit konstanter Geschwindigkeit in Richtung des Wellenvektors \vec{k} ausbreitet. Diese Geschwindigkeit ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit gleicher Phase, die Phasengeschwindigkeit

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k}. \quad (2.3)$$



2. Materiewellen

ω hängt nicht von der Richtung des Wellenvektors \vec{k} ab, kann aber vom Betrag $|\vec{k}|$ abhängen.

Jede Welle kann als Überlagerung von ebenen, monochromatischen Wellen betrachtet werden. Es reicht also die Kenntnis des Dispersionsgesetzes $\omega(k)$ aus um das zeitliche Verhalten einer beliebigen Welle zu bestimmen.

Jede Frequenz ω gehört zu einer bestimmten Teilchenenergie $E = \hbar\omega$. Man kann darum der Welle $\varphi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ eine Bewegung der Energie in Richtung \vec{k} zuordnen. In der quasiklassischen Näherung wird eine Beziehung zwischen \vec{k} und dem Impuls \vec{p} hergestellt. Dies erfordert eine Welle mit begrenzter räumlicher Ausdehnung. Dies wird durch eine Überlagerung von ebenen Wellen mit benachbarten Wellenvektoren erreicht. Es entsteht ein Wellenpaket:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int f(\vec{k}') e^{i(\vec{k}'\vec{r} - \omega' t)} d\vec{k}' \quad (2.4)$$

Mit A bezeichnet man den Betrag und mit α die Phase von f . Gemäß Voraussetzung hat A nur in sehr enger Umgebung von \vec{k} wesentlich von Null verschiedene Werte.

Unter welchen Bedingungen ist die „Bewegung“ dieses Wellenpaketes mit der eines klassischen Teilchens gleichsetzbar? Wir beschränken uns zunächst auf das eindimensionale Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int f(k') e^{i(k'x - \omega' t)} dk' \quad (2.5)$$

und setzen $\varphi = k'x - \omega' t + \alpha$. Daraus folgt für $\psi(x, t)$ ein Integral über einer Funktion A mit ausgeprägtem Maximum in einem Bereich D der Größe Δk um den Punkt $k = k'$, multipliziert mit einer oszillierenden Funktion e^φ . Die betragsmäßig größten Werte für ψ erreichen wir, wenn die Phase φ in D nahezu konstant ist, d.h. wenn

$$\left. \frac{d\varphi}{dk} \right|_{k=k'} \simeq 0. \quad (2.6)$$

Kurz: der Betrag von ψ ist nur nennenswert, wenn e^φ in D höchstens eine Schwingung oder einen Bruchteil davon ausführt, d.h. wenn

$$\Delta k \times \left| \frac{d\varphi}{dk} \right| \lesssim 1. \quad (2.7)$$



2. Materiewellen

Wegen $\frac{d\varphi}{dk} = x - t\frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk}$, ergibt sich die Welle $\psi(x, t)$ in einem Bereich mit der Ausdehnung $\Delta x \simeq \frac{1}{\Delta k}$ um den „Schwerpunkt“ des Wellenpaketes konzentriert, der durch $\frac{d\varphi}{dk} = 0$ definiert wird, also

$$x = t\frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk}. \quad (2.8)$$

Die Geschwindigkeit des Schwerpunktes ist die sogenannte Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (2.9)$$

Die Gruppengeschwindigkeit v_g und nicht die Phasengeschwindigkeit v_φ ist die, welche der Teilchengeschwindigkeit

$$v = \frac{dE}{dp} (\approx \frac{p}{m} \text{ nichtrelativistisch}) \quad (2.10)$$

gleichgesetzt werden muss. Es folgt mit $E = \hbar\omega$; $v = \frac{dE}{dp}$; $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ der Ansatz:

$$\begin{aligned} v &= v_g \\ \Rightarrow \frac{d\hbar\omega}{dp} &= \frac{d\omega}{dk} \\ \Leftrightarrow \frac{d\hbar\omega}{d\omega} &= \frac{dp}{dk} \\ \Leftrightarrow \hbar &= \frac{dp}{dk} \\ \Rightarrow \int \hbar dk &= \int dp \\ \Rightarrow \hbar k &= p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{de Broglie Beziehung}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Verallgemeinert auf ein dreidimensionales Wellenpaket lautet die de Broglie Beziehung:

$$\begin{aligned} v_g &= \text{grad}_{\vec{k}}\omega; \quad v = \text{grad}_{\vec{p}}E \\ \Rightarrow E &= \hbar\omega; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \end{aligned} \quad (2.12)$$



3. Die Schrödingergleichung

Die Intensität der einem Teilchen zugeordneten Welle in einem bestimmten Raumzeitpunkt ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu dieser Zeit an diesem Ort zu finden. Allgemein kann postuliert werden, dass die Wellenfunktion eines Quantensystems den Zustand des Systems vollständig beschreibt. Dies bedeutet, dass sich alle Vorhersagen, die bezüglich der verschiedenen dynamischen Eigenschaften des Systems zu einem gegebenen Zeitpunkt t gemacht werden können, aus der Kenntnis der Wellenfunktion Ψ zu dieser Zeit t herleiten lassen. Das zentrale Problem der Theorie besteht darin, gemäß der bekannten Wellenfunktion zu einem gegebenen Zeitpunkt t_0 diese Funktion für jeden späteren Zeitpunkt zu bestimmen. Dazu muss die Gleichung für die Ausbreitung der Welle Ψ bekannt sein.

Zu dieser Gleichung zu gelangen ist jedoch nicht leicht. Sie muss postuliert werden und dann ihre Rechtfertigung durch überprüfbare Vorhersagen erlangen. Die Wahl der möglichen Wellengleichungen wird durch bestimmte *a priori*-Bedingungen eingeschränkt, will man die Deutung der Wellenfunktion Ψ aufrechterhalten:

1. Die Gleichung muss linear und homogen sein. Dies ist nötig, um die Superpositionseigenschaft für Wellen zu erhalten. Eine Linearkombination $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ zweier Lösungen Ψ_1 und Ψ_2 ist dann wieder eine Lösung dieser Gleichung.
2. Die Gleichung muss eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein. Dann reicht die Kenntnis der Funktion Ψ zu einem gegebenen Anfangszeitpunkt aus, um ihre spätere Entwicklung zu bestimmen. Dies ist gleichbedeutend mit der Forderung, dass der Zustand eines physikalischen Systems vollständig durch eine einmal gegebene Ψ -Funktion bestimmt sein soll.

Desweiteren muss die Gleichung zu den selben Bewegungsgleichungen für Wellenpakete führen, wie die Theorie von de Broglie, wenn man sich in der geometrisch-optischen Näherung befindet. Dies lässt auf eine formale Analogie dieser Gleichung mit bestimmten Gleichungen der klassischen Mechanik schließen (Korrespondenzprinzip).



3.1. Operatoren

An dieser Stelle soll ein mathematischer Begriff erläutert werden, der sich als äußerst nützlich für die Aufstellung der gesuchten Gleichung erweist. Ein Operator ist ein mathematisches Konstrukt, für den teilweise andere algebraische Regeln wie für andere mathematische Ausdrücke gelten. Der Umgang mit Operatoren muss gelernt werden, ist allerdings recht formal und einfach. Zerlegen wir die Funktion $\frac{d\Psi}{dt} = \frac{d}{dt}\Psi$, so kann man sagen der Differentialoperator $\frac{d}{dt}$ wirkt auf Ψ und es entsteht die Funktion $\frac{d\Psi}{dt}$. Allgemeiner formuliert bedeutet dies, wenn durch eine Vorschrift jeder Funktion Ψ eines Funktionenraumes auf genau eine Weise eine wohlbestimmte Funktion Ψ' desselben Raumes zugeordnet wird, so sagt man Ψ' sei durch Einwirkung eines bestimmten Operators A auf die Funktion Ψ in diesem Raum entstanden und schreibt:

$$\Psi' = A\Psi \quad (3.1)$$

Man bezeichnet einen Operator als linear, wenn seine Wirkung auf eine Linearkombination zweier Funktionen aus dem Funktionenraum mit konstanten, komplexen Koeffizienten durch

$$A(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(A\Psi_1) + \lambda_2(A\Psi_2) \quad (3.2)$$

gegeben ist. Zwei Arten von linearen Operatoren im Raum der Wellenfunktionen $\Psi = \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$ sind besonders wichtig:

- (i) Die Differentialoperatoren $\frac{d}{dx}, \frac{d}{dy}, \frac{d}{dz}, \frac{d}{dt}$
- (ii) Operatoren der Form $f(\vec{r}, t)$, deren Wirkung eine Multiplikation von $f(\vec{r}, t)$ mit der Funktion Ψ ist.

Von bestimmten linearen Operatoren kann man durch algebraische Operationen neue lineare Operatoren bilden:

- (i) Multiplikation eines Operators A mit einer Konstante:

$$(cA)\Psi = c(A\Psi) \quad (3.3)$$

- (ii) Summe $S = A + B$ zweier Operatoren A und B :

$$S\Psi = A\Psi + B\Psi \quad (3.4)$$



(iii) Produkt $P = AB$ eines Operators B mit einem Operator A :

$$P\Psi = AB\Psi = A(B\Psi) \quad (3.5)$$

Man beachte, dass das Produkt zweier Operatoren nicht kommutativ sein muss! $AB \neq BA$. Im ersten Fall (AB) wirkt zunächst der Operator B auf die Funktion Ψ und dann A auf die Funktion $(B\Psi)$, im zweiten Fall zuerst A auf Ψ und dann B auf die Funktion $(A\Psi)$. Die Differenz $AB - BA$ nennt man den Kommutator von A und B und wird durch das Symbol $[A, B]$ dargestellt.

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (3.6)$$

Falls die Differenz verschwindet, sagt man, die Operatoren sind vertauschbar oder sie kommutieren. Um eine Verwechslung mit anderen Bezeichnungen auszuschließen verwendet man die Schreibweise für Operatoren mit einem Dach: \hat{A} , \hat{x} , *usw.* Wenn keine Verwechslung möglich ist, werden Operatoren jedoch wie oben angegeben mit Groß- oder Kleinbuchstaben bezeichnet.

Beispiele für kommutierende bzw. nicht-kommutierende Operatoren sind Orts- und Impulsoperatoren. Der Operator für die x -Koordinate ist \hat{x} und für den Impuls in x -Richtung gilt der Operator $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Der Kommutator wird nun auf die Wellenfunktion angewendet.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] \Psi(x) &= x \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) x\Psi(x) \\ &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \left[\Psi(x) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} x \right) - x \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right) \right] \\ &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \left[-i\hbar\Psi(x) - i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right] \\ &= \left[-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi(x) \\ &= i\hbar\Psi(x) \end{aligned}$$

Oder kurz in Kommutatorschreibweise

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

Der Ortsoperator \hat{x} der x -Koordinate und der Impulsoperator \hat{p}_x der x -Komponente des Impulses sind also nicht vertauschbar, sie kommutieren nicht. Anders verhält



es sich z.B. mit dem Ortsoperator \hat{x} der x-Koordinate und dem Impulsoperator der y-Komponente des Impulses $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$; sie kommutieren.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_y] \Psi(x) &= x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(x) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) x \Psi(x) \\ &= \left(-i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(x) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Ebenso kommutieren die Differentialoperatoren $\frac{d}{dx}$, $\frac{d}{dy}$, $\frac{d}{dz}$, $\frac{d}{dt}$ paarweise miteinander. Ein Beispiel für einen Operator aus Summe und Produkt von linearen Operatoren gebildet werden kann ist der Laplace-Operator Δ . Er kann als das Skalarprodukt des Vektoroperators Gradient $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$ mit sich selbst betrachtet werden:

$$\Delta = \text{div grad} = (\nabla \cdot \nabla) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3.7)$$

3.2. Wellengleichung für ein freies Teilchen

Die Theorie der Materiewellen ermöglicht in eindeutiger Weise das Aufstellen der Wellengleichung für ein freies Teilchen (nicht-relativistische Näherung). Die Welle ist eine Superposition aus monochromatischen, ebenen Wellen:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \quad (3.8)$$

Die Frequenz E/\hbar und der Wellenvektor \vec{p}/\hbar sind durch die Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (3.9)$$

miteinander verknüpft.

Wir bilden nun auf beiden Seiten von Gleichung 3.8 die partiellen Ableitungen:

(i)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) &= \int F(\vec{p}) \left(\frac{-i}{\hbar} E \right) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \\ \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) &= \int EF(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \end{aligned} \quad (3.10)$$



(ii)

$$\begin{aligned}\nabla\Psi(\vec{r}, t) &= \int F(\vec{p}) \left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\right) e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d\vec{p} \\ \Leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla\Psi(\vec{r}, t) &= \int \vec{p}F(\vec{p})e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d\vec{p}\end{aligned}\quad (3.11)$$

(iii)

$$\begin{aligned}\Delta\Psi(\vec{r}, t) &= \int F(\vec{p}) \left(\frac{-1}{\hbar^2}p^2\right) e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d\vec{p} \\ \Leftrightarrow -\hbar^2\nabla\Psi(\vec{r}, t) &= \int p^2F(\vec{p})e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d\vec{p}\end{aligned}\quad (3.12)$$

Nach Gleichung 3.9 sind die Integranden der Gleichungen 3.10 und 3.12 proportional. Man erhält schließlich:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t)\quad (3.13)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen. Sie genügt allen in den vorherigen Abschnitten gestellten Forderungen.

3.3. Teilchen in einem skalaren Potential

Um die Wellengleichung eines Teilchen in einem skalaren Potential $V(r)$ aufzustellen wird zunächst von der geometrisch-optischen Näherung ausgegangen. Gesucht ist die Bewegungsgleichung für das Wellenpaket $\Psi(\vec{r}, t)$, welches sich in Übereinstimmung mit der de Broglieschen Theorie bewegt.

Der Schwerpunkt des Pakets bewegt sich wie ein klassisches Teilchen. Seine Lage, Impuls und Energie bezeichnen wir mit \vec{r}_{cl} , \vec{p}_{cl} und E_{cl} . Dann gilt:

$$E_{cl} = \hat{H}(\vec{r}_{cl}, \vec{p}_{cl}) = \frac{p_{cl}^2}{2m} + V(\vec{r}_{cl})\quad (3.14)$$

\hat{H} ist die klassische Hamiltonfunktion. Zunächst wird von einem konservativen System ausgegangen, d.h. $V(\vec{r}_{cl})$ hängt nicht explizit von der Zeit ab. E_{cl} bleibt dann in der Zeit konstant und $\vec{r}_{cl}, \vec{p}_{cl}$ sind Funktionen der Zeit. Unter diesen Vorausset-



3. Die Schrödinger-Gleichung

zungen bleibt $V(\vec{r}_{cl})$ im Bereich der Ausdehnung des Wellenpaketes konstant. Es gilt dann

$$V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \simeq V(\vec{r}_{cl})\psi(\vec{r}, t). \quad (3.15)$$

Weiter betrachtet man so kurze Zeitintervalle, dass die relative Änderung des Impulses vernachlässigt werden dürfen. So kann man $\psi(\vec{r}, t)$ als Superposition von ebenen, monochromatischen Welle ansehen deren Frequenzen in der Umgebung von E_{cl}/\hbar und Wellenvektoren in der Umgebung von \vec{p}_{cl}/\hbar liegen. Es gilt dann:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \simeq E_{cl}\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.16)$$

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\Psi(\vec{r}, t) \simeq \vec{p}_{cl}(t)\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.17)$$

Zuletzt wird noch die Divergenz von Gleichung 3.17 gebildet:

$$-\hbar^2\Delta\Psi(\vec{r}, t) \simeq p_{cl}^2\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.18)$$

Kombiniert man nun die Gleichungen 3.15, 3.16, 3.18 und beachtet man die Gleichung 3.14 so erhält man:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - V\Psi \simeq \left(E_{cl} - \frac{p_{cl}^2}{2m} - V(\vec{r}_{cl})\right)\Psi \simeq 0 \quad (3.19)$$

Das Wellenpaket $\Psi(\vec{r}, t)$ genügt zumindest näherungsweise einer Wellengleichung, wie sie gesucht wird. Es wird postuliert, dass auch außerhalb der geometrisch-optischen Näherung die Welle Ψ der Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.20)$$

genügt. Dies ist die Schrödinger-Gleichung eines Teilchens in einem skalaren Potential $V(\vec{r})$.



3.4. Teilchen in einem elektromagnetischen Feld

Sucht man die Schrödinger-Gleichung eines Teilchen in einem elektromagnetischen Feld, das sich aus einem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ und einem skalaren Potential $\varphi(\vec{r}, t)$ herleitet, so wird die Gleichung 3.14 durch den klassischen Ausdruck

$$E = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}, t) \quad (3.21)$$

ersetzt. Es ergibt sich dann nach einigem Rechnen die Schrödinger-Gleichung eines Teilchen in einem elektromagnetischen Feld:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.22)$$

3.5. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Formal kann die Schrödingergleichung als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \quad (3.23)$$

geschrieben werden. Geht man nun von einem konservativen System aus, ist die Energie also eine Konstante der Bewegung, so hängt der Hamilton Operator \hat{H} in einem solchen System nicht explizit von der Zeit ab. Wir suchen somit eine Wellenfunktion Ψ , die einen Zustand mit der Energie E beschreibt. Die Energie folgt aus der Einsteinschen Relation $E = \hbar\omega$. Die Wellenfunktion Ψ wird zunächst in

$$\Psi = e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} = e^{i(\vec{p}\vec{r})} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (3.24)$$

zerlegt. $\varphi(\vec{r})$ hängt nur noch von der Lage im Konfigurationsraum ab und nicht von der Zeit. Diese umgeschriebene Wellenfunktion setzt man nun in Gleichung 3.23 ein.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= \hat{H} \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ \Rightarrow i\hbar \left(-i\frac{E}{\hbar} \right) \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= \hat{H} \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ \Rightarrow E\varphi(\vec{r}) &= \hat{H}\varphi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die Gleichung 3.25, $\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$, ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung.



3.5.1. Eigenschaften der zeitunabhängigen Schrödingergleichung und Art des Energiespektrums

Am Beispiel eines Teilchens der Masse m in einem skalaren Potential $V(\vec{r})$ sollen nun einige allgemeine Eigenschaften der zeitunabhängigen Schrödingergleichung erläutert werden. Wir gehen davon aus, dass das Potential im unendlichen verschwindet, $V(\vec{r}) \rightarrow 0$ wenn $r \rightarrow \infty$. Wie im Kapitel 3.5 hergeleitet soll φ eine Funktion des Ortsvektors $\vec{r}(x, y, z)$ des Teilchens sein. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet dann

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (3.26)$$

Eine solche partielle Differentialgleichung ist eine Eigenwertgleichung. Eine Lösung $\varphi_E(\vec{r})$ heißt Eigenfunktion zum Eigenwert E des Operators \hat{H} . Dieses Eigenwertproblem ist dann vollständig gegeben, wenn Regularitäts- und Randbedingungen spezifiziert sind, die φ erfüllen muss. Die Bedingungen an φ müssen mit der physikalischen Interpretation der Wellenfunktion verträglich sein. An dieser Stelle soll vorausgesetzt werden, dass die Funktion φ und ihre Ableitungen im gesamten Raum stetig, eindeutig und beschränkt sind. Folgende Fälle gibt es dann zu unterscheiden:

- (i) $E < 0$: Es gibt nur Lösungen für bestimmte Werte von E . Die Lösungen bilden ein diskretes Spektrum. Das Teilchen hält sich in einem begrenzten Bereich auf, befindet sich also in einem sogenannten gebundenen Zustand.
- (ii) $E > 0$: Die Gleichung kann für alle positiven Werte von E gelöst werden. Die Lösungen bilden ein kontinuierliches Spektrum. Man sagt, dass Teilchen befindet sich in einem ungebundenen Zustand.

3.6. Zusammenfassung

Eine Wellengleichung Ψ eines Teilchens muss bestimmte Voraussetzungen erfüllen, damit sie physikalisch sinnvoll und interpretierbar ist. Diese Bedingungen ergeben sich aus dem Korrespondenzprinzip, mathematischen Forderungen und einer physikalischen Interpretation. So ist die Intensität, der einem Teilchen zugeordneten Welle in einem bestimmten Raumzeitpunkt, die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu dieser Zeit an diesem Ort zu finden. Aufgrund dieser Bedingungen gelangt man zur Schrödingergleichung, welche das zeitliche und räumliche Verhalten einer Wellenfunktion,

weiter
nach
„Wir“, und
so gucken.



3. Die Schrödingergleichung

also die Dynamik bestimmt. Die Schrödingergleichung ist die Arbeitsgleichung für die Wellenmechanik.

Für ein freies Teilchen lautet sie:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.27)$$

Für ein Teilchen in einem skalaren Feld gilt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.28)$$

Für die Schrödingergleichung eines Teilchens in einem elektromagnetischen Feld gilt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.29)$$

Betrachtet man konservative Felder, also sich zeitlich nicht ändernde Felder, so ist die Energie eine konstante der Bewegung, der Hamilton-Operator nicht zeitabhängig und es folgt die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (3.30)$$

$\varphi(\vec{r})$ ist hier eine nur vom Ort abhängende Wellenfunktion, die sich aus der Zerlegung der Wellenfunktion Ψ in eine orts- und eine zeitabhängige Funktion ergibt: $\Psi = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. Ist die Energie $E < 0$, so folgt ein diskretes Spektrum an Lösungen. Das Teilchen hält sich dann in einem begrenzten Bereich auf, befindet sich also in einem sogenannten gebundenen Zustand. Ist $E > 0$, so folgt ein kontinuierliches Spektrum von Lösungen. Das Teilchen befindet sich dann in einem ungebundenen Zustand.



4. Eindimensionale Quantensysteme

Wir wollen zunächst den Umgang mit der Schrödingergleichung am Beispiel einiger eindimensionaler Quantensysteme einüben. Eindimensionale Quantensysteme sind nicht nur ein einfaches Modell, sondern es lassen sich auch kompliziertere Systeme gegebenenfalls auf eindimensionale Systeme zurückführen.

Wir beschränken uns auf die Bewegung eines Teilchens der Masse m entlang der x -Achse. Seine Schrödingergleichung lautet dann:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t) \quad (4.1)$$

Insbesondere interessieren wir uns für die stationären Zustände. E sei die Energie eines solchen Zustands. Es gilt dann:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (4.2)$$

φ ist dann Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (4.3)$$

Im Folgenden wollen wir, um Schreibarbeit und Komplexität zu verringern, folgende Beziehungen einführen:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} U(x) \quad ; \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \epsilon. \quad (4.4)$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung geht dann in die Form einer Differentialgleichung vom Sturm-Liouville-Typ über:

$$\varphi'' + (\epsilon - U(x)) \varphi = 0 \quad (4.5)$$

Ziel ist es die im ganzen Intervall $]-\infty, +\infty[$ endlichen, stetigen und differenzierbaren Lösungen zu finden.



Existiert so eine Lösung, ist auch jedes Vielfache dieser Lösung wiederum eine Lösung. Zwei Lösungen die sich also nur um einen konstanten Faktor unterscheiden, werden nicht als verschieden aufgefasst.

Jede Linearkombination zweier (verschiedener) Lösungen ist wieder eine Lösung. Man sagt, der Eigenwert sei zweifach entartet.

Wir definieren: Der Entartungsgrad ist gleich der Anzahl der linear unabhängigen Eigenfunktionen zum betreffenden Eigenwert.

Gleichung 4.5 ist reell. Ist φ eine Eigenfunktion, so ist es auch ihr Real- und Imaginärteil. Real- und Imaginärteil sind Vielfache voneinander, wenn die Eigenfunktion nicht entartet ist! Die Kenntnis der reellen Eigenfunktionen genügt also, um alle Eigenfunktionen zu einem gegebenen Eigenwert bilden zu können.

4.1. Rechteckpotentiale

Damit typische Quanteneffekte auftreten, muss die Größe des Potentials in der Größenordnung der Wellenlänge eine merkbare Änderung aufweisen. Ein einfacher Typ eines solchen Potentials ist ein *Rechteckpotential*. Ein solches Potential ist ein konstantes Potential, welches an einer Stelle einen Sprung endlicher Größe, d.h. eine Unstetigkeit erster Art aufweist. Die *Regularitätsbedingungen* an ψ ändern sich nicht. Zwar weisen U und ψ'' an den Unstetigkeitsstellen, nach der Schrödingergleichung $\psi'' = (U - \epsilon)\psi$, Sprünge endlicher Größe auf, jedoch sind ψ' und ψ überall stetige Funktionen und das Integral über ψ'' bleibt somit an diesen Stellen stetig.

Das Rechteckpotential ($U(x)$)

lässt sich in n Bereiche mit jeweils konstantem Wert unterteilen. U_i sei nun der Wert des Potentials im i -ten Intervall. Die allgemeine Lösung in diesem Intervall ist eine Linearkombination von Exponentialfunktionen.

Diese Exponentialfunktionen verhalten sich unterschiedlich, je nachdem, ob

$(\epsilon - U_i)$ größer oder kleiner als Null ist.²

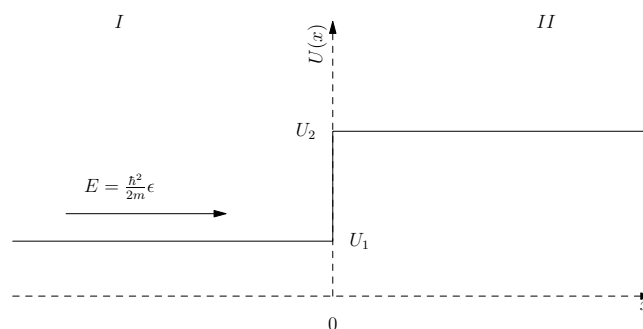


Abbildung 4.1.: Rechteckpotential mit $n=2$ Bereichen als Potentialstufe

²vgl. Messiah [1976] S.79



4. Eindimensionale Quantensysteme

- Wenn $\epsilon > U_i$ ist, dann ist die Lösung eine Linearkombination von imaginären Exponentialfunktionen bzw. eine Kombination von Sinus und Kosinus Funktionen:

$$e^{ik_i x} \quad \text{und} \quad e^{-ik_i x} \tag{4.6}$$

Dabei ist $k_i = \sqrt{\epsilon - U_i}$. Die Lösung verhält sich demnach *oszillatorisch*.

- Ist $\epsilon < U_i$, so ist die Lösung eine Kombination von reellen Exponentialfunktionen.

$$e^{i\kappa_i x} \quad \text{und} \quad e^{-i\kappa_i x} \tag{4.7}$$

Dabei ist $\kappa_i = \sqrt{U_i - \epsilon}$. Die Lösung verhält sich demnach *exponentiell*.

Zur allgemeinen Lösung der Differentialgleichung gelangt man, indem man sie in jedem der n Intervalle als Linearkombination von reellen oder imaginären Exponentialfunktionen aufschreibt. Man erhält $2n$ Konstanten, die durch die Stetigkeitsbedingungen der Funktion und ihrer Ableitung an den $2(n-1)$ Unstetigkeitsstellen des Potentials festgelegt sind. Die Lösung enthält dann zwei beliebige Konstanten. Die Lösung kann nur dann Eigenfunktion sein, wenn sie im ganzen Raum $]-\infty, +\infty[$ beschränkt ist. Bleibt der Wert Energie auf dem gesamten Intervall unter dem Potential, so zeigt die allgemeine Lösung überall ein exponentielles Verhalten. Die Funktion und ihre zweite Ableitung haben dann stets dasselbe Vorzeichen, was auf einen exponentiellen Anstieg an den Grenzen führt. Das Eigenwertproblem hat dann keine Lösung. Dies deckt sich mit den klassischen Ergebnissen, wo eine Bewegung nur dann möglich ist, wenn die Energie eines Teilchens das Potential in wenigstens einem Bereich überschreitet.

Ist ϵ in wenigstens einem Bereich größer als U_i , so hängt die Existenz und Zahl der Eigenfunktionen wesentlich vom Charakter, exponentiell oder oszillatorisch, der allgemeinen Lösung an den Enden $-\infty$ und $+\infty$ der x -Achse ab.³

4.1.1. Potentialstufe, Reflektion und Transmission

Ausarbeitung
des The-
mas
Rechteck-
potentiale

Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis at vero eros et accumsan et iusto

³vgl. Messiah [1976] S.80



4. Eindimensionale Quantensysteme

odio dignissim qui blandit praesent luptatum zzril delenit augue dui dolore te feugait nulla facilisi. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed diam nonummy nibh euismod tincidunt ut laoreet dolore magna aliquam erat volutpat. Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

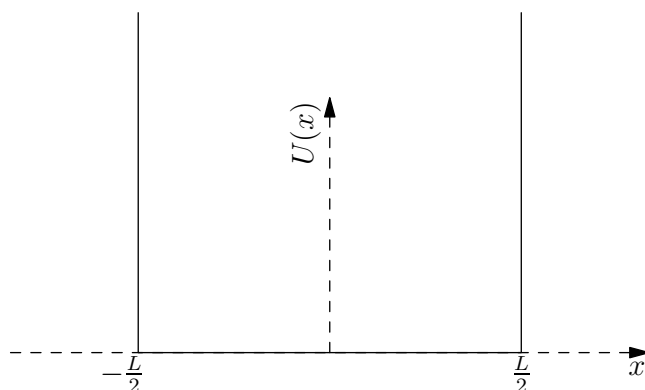


Abbildung 4.2.: Potentialtopf

Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr,

sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

Ut wisi enim ad minim veniam, quis nostrud exerci tation ullamcorper suscipit lobortis nisl ut aliquip ex ea commodo consequat. Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis at vero eros et accumsan et iusto odio dignissim qui blandit praesent luptatum zzril delenit augue dui dolore te feugait nulla facilisi.



4. Eindimensionale Quantensysteme

Nam liber tempor cum soluta nobis eleifend option congue nihil imperdiet doming id quod mazim placerat facer possim assum. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed diam nonummy nibh euismod tincidunt ut laoreet dolore magna aliquam erat volutpat. Ut wisi enim ad minim veniam, quis nostrud exerci tation ullamcorper suscipit lobortis nisl ut aliquip ex ea commodo consequat.

Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis. Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

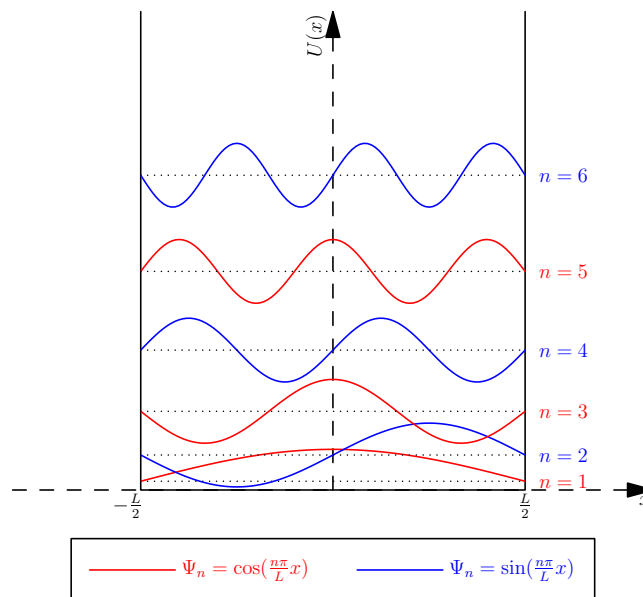


Abbildung 4.3.: Potentialtopf mit Eigenfunktionen

Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat,



4. Eindimensionale Quantensysteme

sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

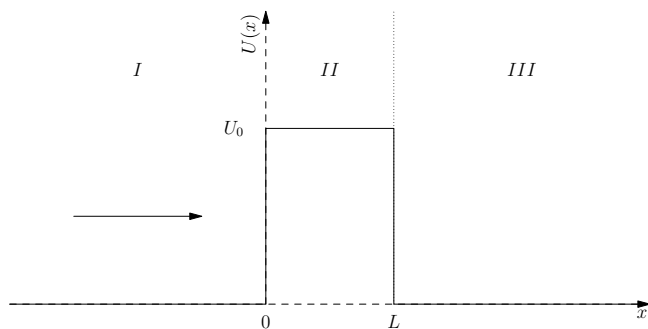


Abbildung 4.4.: Potentialtopf mit Eigenfunktionen

At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna ali-

quyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, At accusam aliquyam diam diam dolore dolores duo eirmod eos erat, et nonumy sed tempor et et invidunt justo labore Stet clita ea et gubergren, kasd magna no rebum. sanctus sea sed takimata ut vero voluptua. est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat. Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita



kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

Consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.



5. Statistische Deutung des Welle-Teilchen-Dualismus und Unschärferelation

Ausarbeitung
des The-
mas
Statis-
tische
Deutung

Asymptote
Test



6. Formalismus und Deutung der Wellenmechanik

Ausarbeitung:
Klassische
Näherung
und
WKB-
Methode



7. Klassische Näherung und WKB-Methode

Ausarbeitung
des The-
mas
Klassische
Näherung
und
WKB-
Methode



8. Allgemeiner Formalismus der Quantentheorie/Mathematischer Rahmen

Ausarbeitung
des The-
mas
Forma-
lismus/-
Mathe-
matischer
Rahmen



Literaturverzeichnis

Bronstein 2001

BRONSTEIN, I.N.: *Taschenbuch der Mathematik*. unver. Nachdruck der 5. Auflage. Frankfurt am Main : Verlag Harri Deutsch, 2001. – Im Auftr. d. Verlages Harri Deutsch erarbeitete und erweiterte Lizenzausgabe der bis 1977 im Verlag FIZMATLIT(Moskau) erschienenen russischen Originalausgabe: I.N. Bronstein, K.A. Semendjaev: Taschenbuch der Mathematik für Ingenieure und Studenten

Goering 1971

GOERING, Herbert: *Elementare Methoden zur Lösung von Differentialgleichungsproblemen*. 2. berichtigte Auflage. Berlin : Akademie Verlag, 1971

Haken und Wolf 2000

HAKEN, H. ; WOLF, H.C.: *Atom und Quantenphysik*. 7. Auflage. Berlin Heidelberg New York : Springer-Verlag, 2000 [1.2.3](#), [1](#)

Haken und Wolf 2003

HAKEN, H. ; WOLF, H.C.: *Molekülphysik und Quantenchemie*. 4. völlig neubearb. und erw. Auflage. Berlin Heidelberg New York : Springer-Verlag, 2003

Kittel 2006

KITTEL, Charles: *Einführung in die Festkörperphysik*. 14. überarbeitete Auflage. München : Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2006

Landau 1967a

LANDAU, Lev D.: *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Bd. 2: *Klassische Feldtheorie*. 4., berichtigte Auflage. Berlin : Akademie-Verlag Berlin, 1967. – Original erschienen im Staatsverlag für physikalisch-mathematische Literatur, Moskau, Hrsg. d. dt. Ausgabe: Prof. Dr. Gerhard Heber

Landau 1967b

LANDAU, Lev D.: *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Bd. 3: *Quantenmechanik*. 3., berichtigte Auflage. Berlin : Akademie-Verlag Berlin, 1967. – Original erschienen im Staatsverlag für physikalisch-mathematische Literatur, Moskau, Hrsg. d. dt. Ausgabe: Prof. Dr. Gerhard Heber [1.2.3](#)

**Landau 1969**

LANDAU, Lev D.: *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Bd. 1: *Mechanik*. 6., berichtigte Auflage. Berlin : Akademie-Verlag Berlin, 1969. – Original erschienen im Staatsverlag für physikalisch-mathematische Literatur, Moskau, Hrsg. d. dt. Ausgabe: Prof. Dr. Gerhard Heber

Landau 1975

LANDAU, Lev D.: *Theoretische Physik kurzgefasst*. Bd. 2: *Quantentheorie*. München : Carl Hanser Verlag, 1975. – Original erschienen im Verlag Nauka, Moskau, Hrsg. d. dt. Ausgabe: Dr. Siegfried Matthies

Lindner 1997

LINDNER, Albrecht: *Grundkurs Theoretische Physik*. 2. überarb. und erw. Auflage. Stuttgart : Teubner, 1997

Messiah 1976

MESSIAH, Albert: *Quantenmechanik*. Bd. 1. 2. unveränderter Nachdruck 1981. Berlin New York : de Gruyter, 1976. – Titel der französischen Originalausgabe von 1969: *Mecanique Quantique* [2](#), [3](#)

Tipler 2000

TIPLER, Paul A.: *Physik*. 3. korrigierter Nachdruck der 1. Ausgabe 1994. Heidelberg Berlin : Spektrum Akademischer Verlag, 2000



A. Anhang



A.1. Mathematischer Anhang

Zum besseren Verständnis und tieferen Lektüre des Interessierten Lesers...

A.1.1. Formelsammlung



Abkürzungsverzeichnis

SI (Système international d'unités) Internationales Einheiten-
system



Abbildungsverzeichnis

1.1. Bahnen und Übergänge im Bohrschen Atommodell	9
4.1. Rechteckpotential mit $n=2$ Bereichen als Potentialstufe	24
4.2. Potentialtopf	26
4.3. Potentialtopf mit Eigenfunktionen	27
4.4. Potentialtopf mit Eigenfunktionen	28



Tabellenverzeichnis

1.1. Atomradien in nm einiger Edelgase	4
--	---