

Anmerkung zum Kapitel I.4.

Zusammenfassung zum Welle-Teilchen-Dualismus

	Wellencharakter	Teilchencharakter
Licht	Klass. E-Dynamik: Welle mit $\omega = ck$ \underline{k} Wellenvektor	QM: Photonen $E = \hbar\omega$ $\underline{p} = \hbar\underline{k}$
Elektronen (Materie)	QM: $\omega = \frac{E}{\hbar}$ $\underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}$ $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (für freie Teilchen)	Klassisch: Teilchen mit \underline{p} , $E = \frac{\underline{p}^2}{2m}$ (nicht-relativistisch)

II. Schrödinger'sche Wellenmechanik

II. 1. Materiewellen

ein fadester Ansatz (siehe Elektrodynamik)

ebene Welle:

$$i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)$$

$$\psi(\underline{r}, t) = A e$$

„Wellenfunktion“

A Amplitude
 \underline{k} Wellenvektor

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$:

ω Frequenz, t Zeit

Wellenfunktion eines
freien Teilchens!

man erkennt bereits hier ein
Problem:

Die WF (Wellenfunktion)

soll ein räumlich lokalisiertes

Teilchen beschreiben, unser Ansatz erstreckt sich
aber über den gesamten Raum

nächster Schritt (Idee aus der E-Dynamik)

→ Bilde Überlagerung (Superposition) ebener Wellen

→ „Wellenpaket“

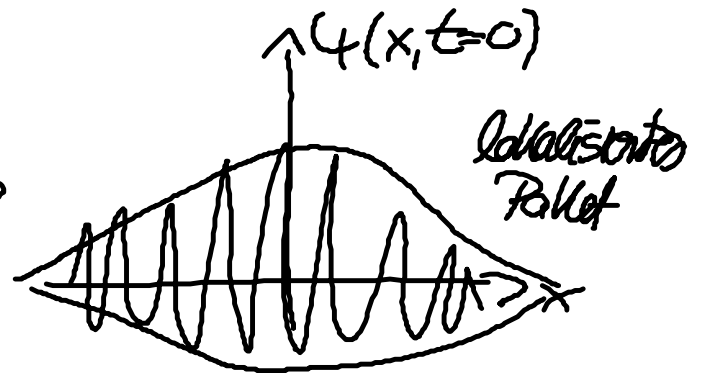
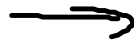
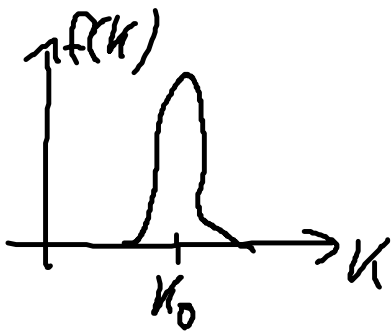
$$\psi(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k})$$

$f(\underline{k})$: „Gewichtsfunktion“

später:

$f(k)$ ist im wesentlichen
die Fouriertransformierte von $\psi(x, t=0)$

z.B.
in einer
Dimension



Warum ist es überhaupt wichtig, lokalisierte Pakete zu haben?

→ Deutung der Materiewellen durch Max Born

Die Größe

$$|\psi(\underline{r}, t)|^2 d\underline{r} = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) d\underline{r}$$

gibt die Wahrscheinlichkeit an, ein Teilchen zu Zeit t in einem Volumenelement $d\underline{r}$ um den Ort \underline{r} zu finden

→ „Aufenthaltswahrscheinlichkeit“

(\rightarrow d.h. Teilchen mit $\psi(\underline{r}, t=0) \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$
 $\psi\psi^* \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \cdot e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} = 1$)

Folgerung:

Die Wkrsch., das Teilchen irgendwo
im Raum (d.h. in einem Volumen V)
zu finden, ist

$$\int_V |\psi(\underline{r}, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

„Erhaltung der
Wahrscheinlichkeit“

$\psi(\underline{r}, t)$ muß „quadratintegrierbar“ sein,

d.h. $\int_V |\psi(\underline{r}, t)|^2 < \infty$

Bemerkung:

Für nicht-lokalisierte Wellen,
d.h. $\psi(\underline{r}, t) \sim e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$

Schreibt man oft:

$$\psi(\underline{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

$$\Rightarrow \int_V d\underline{r} |\psi(\underline{r}, t)|^2 = \int_V d\underline{r} \frac{1}{V} = 1$$

Zurück zum Wellenpaket

$$\psi(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k})$$

speziell $t=0$:

$$\psi(\underline{r}, t=0) = \int d\underline{k} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} f(\underline{k})$$

„mathemat. Nebenbemerkung“

$f(\underline{k})$ ist bis auf einen verfallenden Faktor gerade die sogenannte Fouriersumme von $\psi(\underline{r}, t=0)$

allgemein:

$$\psi(\underline{r}) \Big|_{t=0} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \underbrace{\phi(\underline{k})}_{\text{Fouriertransformiert}}$$

Umkehrung:

$$\int d\underline{r} e^{-i\underline{k}' \cdot \underline{r}} \psi(\underline{r})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k} \phi(\underline{k}) \int d\underline{r} e^{i(\underline{k}-\underline{k}') \cdot \underline{r}}$$

benutze: $\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{r} e^{i(\underline{k}-\underline{k}') \cdot \underline{r}} = \delta(\underline{k}-\underline{k}')$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k} \phi(\underline{k}) \delta(\underline{k}-\underline{k}') = (2\pi)^{3/2} \phi(\underline{k}')$$

$$\Rightarrow \phi(\underline{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{r} e^{-i\underline{k} \cdot \underline{r}} \psi(\underline{r}) \Big|_{t=0}$$

Durch Vergleich ergibt sich:

$$f(\underline{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \phi(\underline{k})$$

Gewichtsfunktion
in unserem
Wellenpaket

Fouriertransformiert

In der QM verwendet man statt \underline{k} (Wellenvektor)

häufig den Impuls \underline{p}
(wegen: $\underline{p} = \hbar \underline{k}$)

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

definiere: $\hat{\Psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2} \Phi(\underline{k})$

benutze außerdem, $\underline{p} = \hbar \underline{k}$

$$\begin{aligned} \text{daß } d\underline{k} &= dk_x dk_y dk_z \\ &= \hbar^{-3} dp_x dp_y dp_z \\ &= \hbar^{-3} dp \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{p_x}{\hbar} \\ k_y &= \frac{p_y}{\hbar}, \quad k_z = \frac{p_z}{\hbar} \end{aligned}$$

Wellenfunktion im Ortsraum

$$\Rightarrow \Psi(\underline{r}, t=0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{p} e^{i \hbar^{-1} \underline{p} \cdot \underline{r}} \hat{\Psi}(\underline{p})$$

$$\hat{\Psi}(\underline{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r} e^{-i \hbar^{-1} \underline{p} \cdot \underline{r}} \Psi(\underline{r}, t=0)$$

↳ Impulswellenfunktion

Es gibt also zwei Möglichkeiten,
bereits hier

den „Zustand“ des Teilchens zu beschreiben.

- Wellenfunktion im Ortsraum (Materiewelle)
- Impuls-Wellenfunktion

Zurück zum Wellenpaket:

Wie ~~ist~~ bewegt sich dieses Wellenpaket?

man unterscheidet:

a) Die "Phasengeschwindigkeit": $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$ mit $k = |K|$

dreidimensional:

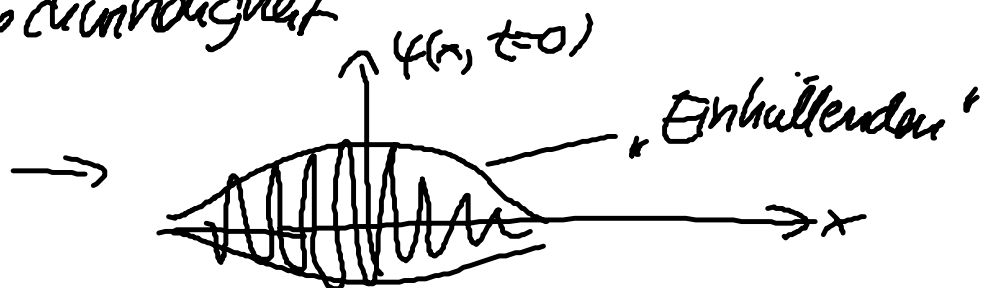
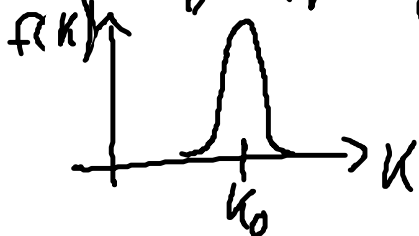
$$\underline{v}_{ph} = \frac{\omega}{k} \hat{k}$$

Einheitsvektor in k -Richtung

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (freies Teilchen) $\Rightarrow \underline{v}_{ph} = \frac{\hbar k}{2m} \hat{k} = \frac{\hbar K}{2m} = \frac{p}{2m}$

Unterschied zur klass. Mechanik,
wo $\underline{v} = \frac{p}{m}$

b) Die "Gruppen geschwindigkeit"



nehme im folgenden an, daß

$f(\underline{k})$ „gepeakt“ ist um $\underline{k} = \underline{k}_0$

im Integral
$$\psi(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k})$$

entwickelt man die Winkelgeschwindigkeit
 $\Rightarrow \omega = \omega(\underline{k})$ um $\underline{k} = \underline{k}_0$!

$$\omega \approx \underbrace{\omega(\underline{k} = \underline{k}_0)}_{\omega_0 \text{ konstant}} + \nabla_{\underline{k}} \omega \Big|_{\underline{k} = \underline{k}_0} \overbrace{(\underline{k} - \underline{k}_0)}^{\Delta \underline{k}} + \mathcal{O}((\Delta \underline{k})^2)$$

Einsetzen:

$$\psi(\underline{r}, t) = e^{i(\underline{k}_0 \cdot \underline{r} - \omega_0 t)} \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r} - i \nabla_{\underline{k}} \omega|_{\underline{k}_0} \Delta \underline{k} t + \dots}$$

$$\Rightarrow \psi(\underline{r}, t) = e^{i(\underline{k}_0 \cdot \underline{r} - \omega_0 t)} \cdot \tilde{E}(\underline{r}, t)$$

ebene Welle

mit
$$\tilde{E}(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r} - \nabla_{\underline{k}} \omega|_{\underline{k}_0} t + \dots}$$

„Enkullende“

Interpretation im Argument der Exponentialfunktion
im Integral

$$\underline{v}_g = \nabla_{\underline{k}} \omega \Big|_{\underline{k}_0} = \nabla_{\underline{k}} \frac{\hbar k^2}{2m} \Big|_{\underline{k}_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \hat{k}_0$$

Gruppengeschwindigkeit \quad freies Teilchen $\quad = \frac{p_0}{m}$

d.h. die Gruppengeschwindigkeit
ist analog zur Geschw. eines
klassischen Teilchens m dem Sinus,

$$\text{da\ss } \underline{v}_g = \frac{p_0}{m}$$

Bemerkung (\rightarrow Übungsblatt)

Die Einhüllende verbreitert sich mit der Zeit
„das Wellenpaket zerfließt“ !

II-2. Die Schrödingergleichung

\rightarrow Bewegungsgleichung für die
Wellenfunktion $\psi(\underline{r}, t)$

— nicht nur im Kräftefreien
Fall, sondern auch mit Kräften

Anforderungen:

- i) Für den Kräftefreien Fall sollen die Lösungen gerade ebene Wellen (oder Überlagerungen) davon sein, und $\omega = \frac{h k^2}{2m}$
- ii) Die Gleichung muß linear in ψ sein, damit das Superpositionsprinzip überhaupt gilt!

→ Konstruktion von Wellenpaketen

→ zur Realisierung typischer Welleneigenschaften wie Interferenz