3.2 Wellenpakete

b) Fourier-Transformation

- **Satz:** Geg: stückweise, stetiges $f(x)$ mit $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)| < \infty$

$\longrightarrow$ Fourier-Transformierte:
$$\bar{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\, f(x)\, e^{-ikx} \tag{3.4}$$

$\xrightarrow{\text{o.B.}}$ Fourier-Entwicklung:
$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, \bar{f}(k)\, e^{ikx}$$

- Parsevalsches Theorem:

Geg: $f(x)$, $g(x)$ und $\bar{f}(k)$, $\bar{g}(k)$

$$\longrightarrow \int dx\, f^*(x)\, g(x) = \int dk\, \bar{f}^*(k)\, \bar{g}(k)$$

Beweis:
$$\int dx\, f^*(x) g(x) \overset{(3.4)}{=} \iiint dx \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}}\, \bar{f}^*(k')\, \bar{g}(k)\, \underbrace{e^{i(k-k')x}}_{= \delta(k-k')!}$$
$$= \iint dk\, dk'\, \bar{f}^*(k')\, \bar{g}(k)\, \delta(k-k')$$
$$= \int dk\, \bar{f}^*(k)\, \bar{g}(k) \qquad \text{qed}$$

- 3D:
$$f(\underline{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \bar{f}(\underline{k})\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$
mit
$$\bar{f}(\underline{k}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^{3/2}}\, f(\underline{r})\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

c) <u>Wellenpakete</u>: i.f. $\boxed{\underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}\ , \ \omega = \frac{E}{\hbar}}$

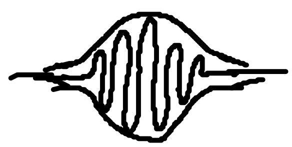
- Paket bei $t=0$:

$$\psi(\underline{r},0) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \bar{\psi}(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \qquad (3.8)$$

$$\text{mit } \bar{\psi}(\underline{p}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \psi(\underline{r},0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

NB: $x, k_x, \ldots \longrightarrow \frac{x}{\sqrt{\hbar}}, \frac{p_x}{\sqrt{\hbar}}$ etc.

- $\psi(\underline{r},0) \hat{=}$



„lokalisiertes Teilchen"

$\hat{=}$ Überlagerung ebener Wellen

- Zeitentwicklung: SG (3.1): Faktor: $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ [s. Lsg. Gl. (3.2)]

$$\psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \bar{\psi}(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et)} \qquad (3.9)$$

$$\text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

- $\bar{\psi}(p)$ … Amplitude einer Welle mit Impuls $\underline{p}$

> $|\bar{\psi}(p)|^2 d^3p$ .. Wahrscheinlichkeit, Teilchen mit Impuls $\underline{p}$ im Impulsvolumen d^3p vorzufinden (3.10)
>
> Normierung: $\int d^3p\, |\bar{\psi}(p)|^2 = 1 \qquad (3.11)$

Beweis: (3.11): $\int d^3p\, |\bar{\psi}(p)|^2 = \int d^3p\, \bar{\psi}^*(\underline{p})\, \bar{\psi}(\underline{p})$

$$\underset{\text{Parsevalsche Theorem}}{\overset{(3.6)}{=}} \int d^3r\, |\psi(r)|^2 = 1$$

- Sprache: „$\bar{\psi}(\underline{p}) \underset{\text{„entspricht"}}{\hat{=}} \psi(\underline{r})$ projiziert auf Impulszustand $\underline{p}$"

Wahrscheinlichkeiten $\xrightarrow[\text{Kap. 2.4}]{}$

d) **Mittelwerte**: $\boxed{\text{„Was beobachtet man bei Mittelung über Ensemble vieler, gleicher Systeme / Teilchen?"}}$

- mittlerer Ort: $\langle \underline{r} \rangle = \int d^3r \; \underline{r} \; |\psi(\underline{r},t)|^2$ (3.12)

  " Impuls: $\langle \underline{p} \rangle = \int d^3p \; \underline{p} \; |\bar{\psi}(\underline{p},t)|^2$ (3.13)

"Unschärfe" aus mittlerer quadratischen Abweichung: vgl. (2.29)

$$(\Delta \underline{r})^2 := \langle [\underline{r} - \langle \underline{r} \rangle]^2 \rangle = \langle \underline{r}^2 \rangle - \langle \underline{r} \rangle^2 \quad (3.14)$$

$$(\Delta \underline{p})^2 := \langle [\underline{p} - \langle \underline{p} \rangle]^2 \rangle = \langle \underline{p}^2 \rangle - \langle \underline{p} \rangle^2 \quad (3.15)$$

- pathologisches Bsp:

(i) $$\psi(\underline{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}_0 \cdot \underline{r} - Et)} \quad (3.16)$$

$$\left.\begin{aligned} \longrightarrow \quad \langle \underline{r} \rangle &= \int_{\text{„}-\infty\text{"}}^{\text{„}\infty\text{"}} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3} \, \underline{r} \quad \text{„} = 0 \text{"} \\ (\Delta \underline{r})^2 &= \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3} \, \underline{r}^2 \quad \text{„} = \infty \text{"} \end{aligned}\right\} \quad (3.17)$$

ψ nicht normierbar!

$\hat{=}$ Teilchen ist überall!

(ii) $$\bar{\psi}(\underline{p},t) \overset{(3.8)}{=} \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\underline{r},t) \, e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

$$= \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3} \, e^{\frac{i}{\hbar} \underbrace{(\underline{p}_0 - \underline{p}) \cdot \underline{r}}_{(\ldots)_x x + (\ldots)_y y + (\ldots)_z z}} \, e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

$$\text{mit } \frac{1}{2\pi}\int d\frac{x}{\hbar}\, e^{i(p_{0x}-p_x)\frac{x}{\hbar}} = \delta(p_{0x}-p_x)\,!$$

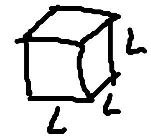
$$= \delta(p_{0x}-p_x)\,\delta(p_{0y}-p_y)\,\delta(p_{0z}-p_z)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\longrightarrow \quad \bar{\Psi}(\underline{p},t) = \delta(\underline{p}_0-\underline{p})\, e^{-i/\hbar\, Et} \qquad (3.18)$$

$\hat{=}$ Teilchen mit scharfem Impuls $\underline{p}_0$!

Achtung: $\langle \underline{p} \rangle$, $(\Delta \underline{p})^2$ existieren nicht!

- **Bsp II**: „freies Teilchen" im Volumen $V = L \times L \times L$



& periodische Randbedingungen

$$\longrightarrow \quad \psi(\underline{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}_0\cdot\underline{r} - Et)} \qquad (3.19)$$

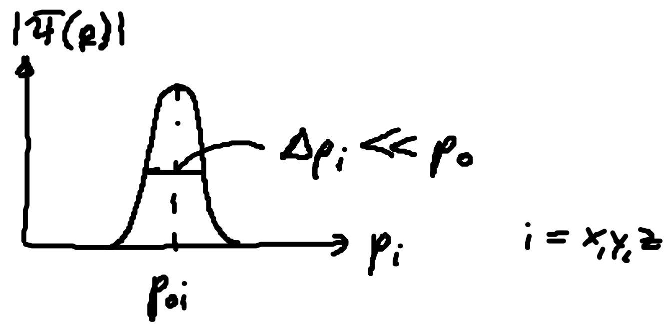
$$\underbrace{p_{0i} = \hbar\frac{2\pi}{L} n_i}_{\text{nur diskrete } \underline{p}\,!!}, \quad i = x,y,z, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

$$\longrightarrow \quad \left.\begin{aligned} \langle \underline{r} \rangle &= 0 \\ (\Delta \underline{r})^2 &= \left(\frac{L}{2}\right)^2 \end{aligned}\right\} \quad (3.20)$$

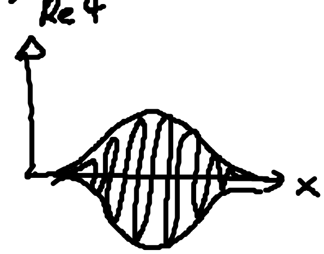
s. Übungen

e) Gruppengeschwindigkeit $\underline{v}_{gr}$: „Geschw. eines Wellenpaketes"

- Sei $\bar{\Psi}(\underline{p}) = |\bar{\Psi}(\underline{p})|\, e^{i\alpha(\underline{p})}$



$$\longrightarrow \Psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, |\tilde{\Psi}(p)| \, e^{i/\hbar\,(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et + \hbar\alpha)}$$



(i) "fast alle" $\underline{r}$: starke Oszillationen des Integr. $e^{\cdots}$ bei Variation von $\underline{p}$ $\longrightarrow \Psi(\underline{r},t) = 0$

(ii) $\Psi(\underline{r},t)$ maximal am $\underline{r} = \underline{r}_m$, wenn alle Partialwellen $e^{\cdots}$ gleiche Phase haben, bei Variation von $\underline{p}$
($\rightarrow$ konstruktive Interferenz)

$\hat{=}$ Methode der stationären Phase:

$$\boxed{\nabla_p \left(\underline{p}\cdot\underline{r} - \underline{Et} + \underset{\sim}{\hbar\alpha}\right)\Big|_{p_0} = 0} \quad (3.21)$$

$\longrightarrow$ Maximum/Zentrum von $\Psi(\underline{r},t)$:

$$\boxed{\underline{r}_m = \underline{v}_{gr}\,\underline{t} + \underset{\sim}{\underline{r}_0} \quad \text{mit } \underline{r}_0 = -\hbar \nabla_p \alpha(p)\Big|_{p_0}} \quad (3.22)$$

$$\boxed{\underline{v}_{gr} = \nabla_p E(p)\Big|_{p_0} = \nabla_k \omega(\underline{k})\Big|_{p_0 = \hbar \underline{k}}}$$

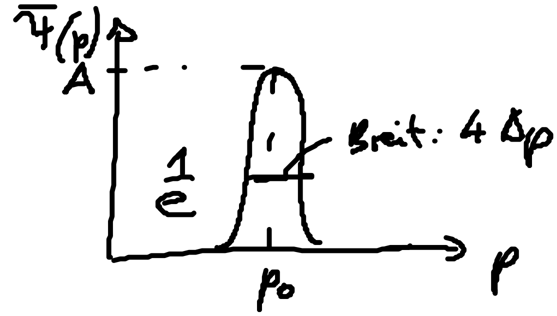
Deutung: $\underline{r}_m(t) \approx \langle \underline{r} \rangle (t)$ ... „Ort des klass. Teilchens"

$\underline{v}_{gr} = \nabla_k \omega(\underline{k})\Big|_{\underline{k}_0} = \frac{\hbar \underline{k}_0}{m} = \frac{\underline{p}_0}{m} \approx \frac{\langle \underline{p} \rangle}{m}$ ... „Geschw. des klass. Teilchens"

f) <u>Gaußsches Wellenpaket</u> (1dim): wichtig! zur Illustration

- **Def:**

$$\boxed{\psi(x,t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \bar{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}, \quad E = \frac{p^2}{2m} \\ \text{mit } \bar{\psi}(p) = \underbrace{A\, e^{-(p-p_0)^2/[4(\Delta p)^2]}}_{\text{Gauß-Verteilung}}, \quad \underbrace{A = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi \Delta p^2}}}_{\text{aus Normierung: } \int |\bar{\psi}(p)|^2 dp = 1}} \qquad (3.24)$$



- hier: Diskussion
  Übungen: Beweise
- Impuls: Mittelwerte: $\langle p \rangle \overset{(3.13)}{=} p_0$
  Unschärfe: $[\langle (p-p_0)^2 \rangle]^{1/2} \underset{(3.15)}{=} \Delta p$ $\Bigg\}$ (3.25)

- Ausführung FT in (3.24) $\longrightarrow \psi(x,t)$ (komplexe Gauß-Fkt)
  $\mathrm{Re}\,\psi$, $\mathrm{Im}\,\psi$