f) Gaußsches Wellenpaket (1dim)

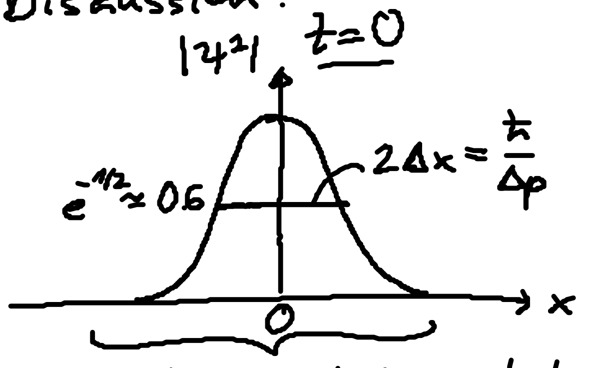
· **Def.:**

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

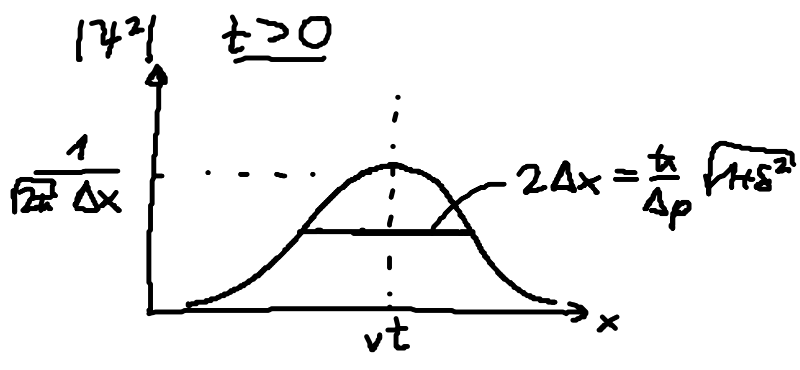
· Ausführung der FT in (3.24) $\longrightarrow$ $\psi(x,t)$ .. komplexe Wellenfkt

$$\Longrightarrow \boxed{\begin{aligned} &|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta x}\, e^{-\frac{(x-vt)^2}{2(\Delta x)^2}} \quad \text{... Gauß-Verteilung!} \\ &\text{mit } \langle x \rangle = vt, \quad v = \frac{p_0}{m} \\ &\text{Unschärfe:} \quad \Delta x = \left[\langle (x-vt)^2 \rangle\right]^{1/2} = \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{2\,\Delta p/\hbar} \quad \text{mit } \delta = \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar m}\, t \end{aligned}} \qquad (3.26)$$

· Diskussion:



Teilchen am lokalisiertesten
≙ Δx am kleinsten



„Teilchen" / Wellenpaket
zerfließt!

$\hat{=}$ Dispersion

- Wichtig!

$$\boxed{\Delta x\, \Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+s^2} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{... Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und Impuls} \quad (3.27)}$$

(i) Ort und Impuls können nicht gleichzeitig beliebig scharf gewählt werden $\longrightarrow$ <u>kein</u> klassisches Teilchen

(ii) $\Delta x\, \Delta k \geq \frac{1}{2}$ ist allgemein gültig für Wellenpakete

Eigenschaft der FT.: $\Delta x \to 0,\ \Delta k \to \infty$

$\Delta x \to \infty,\ \Delta k \to 0$

QT: Anwendung auf Welle-Teilchen-Dualismus

- <u>Bsp:</u>

(i) makroskop. Teilchen: $\Delta v = 10^{-4}\,\frac{m}{s}$

$\approx$ <u>klassisches Teilchen</u> $\longrightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta v} = 10^{-24}\,m$

$m = 10^{-6}\,kg$

1mm Sandkorn

$= \underline{10^{-14}\ \text{Atomradien!!}}$

(ii) mikroskopisches Teilchen:

e^- im Atom: $\Delta x = a_1 \overset{(2.12)}{=} 0{,}5\,Å$ ... Bohrscher Radius

$\longrightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \approx 10^{-24}\,\frac{kg\,m}{s}$

$\longrightarrow \Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m_e} \approx 4\,eV$

vgl. Bindungsenergie im H-Atom

$|E_1| = Ry = 13\,eV$

$\longrightarrow e^-$ kein klass. Teilchen,

verschmiert über Atom

3.3 Die Schrödingergleichung (SG)

- Ziel: SG für Wellenfkt. eines Teilchens im Pot. $U(r)$?
  formale Regel zum Aufstellen?

a) freie SG:
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi \quad (3.1)$$

- Erinnerung:
  Energieerhaltungssatz (EES) für freies Teilchen
  $$E = \frac{p^2}{2m} =: H_0 \quad \ldots \text{ „Hamiltonfkt" des freien Teilchens}$$
  (3.28)

- Führe Operatoren ein: wirken auf Fktn. $f(\underline{r},t)$ [s. Kap. 4.1b]

$$\boxed{\begin{array}{llll} E & \longrightarrow & i\hbar\frac{\partial}{\partial t} & \ldots \text{ „Energieoperator"} \\ p & \longrightarrow & \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} & \ldots \text{ Impulsoperator} \end{array}} \quad (3.29)$$

← sinnvolle Identifikation s. Kap. 4.2 / 5.2

… Korrespondenz-Regel

also: $H_0 = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (3.30)$

… freie Hamiltonoperator

- damit:
  $E = H_0 \xrightarrow[\text{wendet auf } \psi]{\text{Operator angewendet}}$
  EES der klass. Mechanik

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}_0\psi \underset{(3.30)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\psi(\underline{r},t)$$

… freie SG

b) allgemeine SG:

- Mitnahme von Potential $U(\underline{r})$?
- „Herleitung / Motivation": Messiah, anschaulich
  Nolting, über Hamilton-Jacobi

formale Analogie zwischen

(i) Hamiltonsches Wirkungsprinzip $\delta \int L\,dt = 0$

für klassisches Teilchen

und (ii) Fermatsches Prinzip für geometr. Optik von Licht: $\delta t = 0$

$$\text{mit } t = \frac{1}{\omega}\int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} \underline{k}\cdot d\underline{r} = \frac{1}{c}\int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} n(\underline{r})\,\hat{\underline{k}}\cdot d\underline{r}$$

... Zeit um von $\underline{r}_1$ nach $\underline{r}_2$ zu gelangen

n: Brechungs-index

$\underline{k} = k\,\hat{\underline{k}}$

$k = \frac{2\pi}{\lambda} n$

$c = \lambda\nu = \lambda\frac{\omega}{2\pi}$

Wellengl. für Licht $\longleftrightarrow$ Wellengl. für Materie

...

• direkter: Korrespondenz-Regel

$$\text{EES: } \boxed{E = H \xrightarrow[\text{auf } \psi]{\text{Operatoren angewendet}} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi} \quad (3.31)$$

... allg. SG

• Hamiltonfkt.: $H = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{U(\underline{r})}_{\text{pot. Energie}}$

mit $\boxed{\underline{r} \longrightarrow \hat{\underline{r}} = \underline{r}}$ (3.32) ← sinnvolle Identifikation s. Kap. 4.2/S.2

$$\boxed{H \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})} \quad (3.33)$$

→ allgemeine Schrödinger-Gl.

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}\psi(\underline{r},t) \text{ mit } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})} \quad (3.34)$$

• SG ist Dgl. 1. Ord. in t

→ Präpariere Teilchen mit $\psi(\underline{r},0)$

→ SG beschreibt Zeitentwicklung von $\psi(\underline{r},t)$.

$$d\psi(\underline{r},t) = dt\,\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\psi(\underline{r},t)$$
$$\psi(\underline{r},t+dt) = \psi(\underline{r},t) + d\psi(\underline{r},t) \quad !$$

· weitere Bem.:

(i) (3.31) gilt auch, wenn $\hat{H} = \hat{H}(t)$ (kein EES!)

(ii) geladenes Teilchen im em Feld

$$H = \frac{1}{2m}\left(\underline{p} - q\,\underline{A}(\underline{r},t)\right)^2 + q\varphi(\underline{r},t)$$

$$\xrightarrow[\text{Reihenfolge}]{\text{Achtung}} \quad \hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{\underline{p}}^2 \underline{- q\,\hat{\underline{p}}\cdot\underline{A} - q\,\underline{A}\cdot\hat{\underline{p}}} + q^2\underline{A}^2\right] + q\varphi$$

$$\text{mit} \quad \underline{\hat{\underline{p}}\cdot(\underline{A}\psi) \neq \underline{A}\cdot(\hat{\underline{p}}\psi)}$$

$$\longrightarrow \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\cdot(\underline{A}\psi) \neq \underline{A}\cdot\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\psi$$

(iii) ^ ... oft weggelassen

· Merkmal der QT:

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{• physikal. Größen/Observablen (Ort, Impuls, Energie)} \\ \qquad \longrightarrow \text{Operatoren} \qquad\qquad \text{(s. Kap. 4)} \\ \text{• wichtig: Kommutatoren von Operatoren}\end{array}}$$

3.4 Kontinuitätsgleichung für $|\psi(\underline{r},t)|^2$

· Herleitung:

$$\left.\begin{array}{l} \psi^* \,|\; i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})\right)\psi \quad |^* \\ \psi \,|\; -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(r)\right)\psi^* \end{array}\right\} \ominus$$

$$i\hbar\underbrace{\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)}_{\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\psi^*\underline{\nabla}^2\psi - \psi\underline{\nabla}^2\psi^*\right)}_{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x_i}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x_i}\psi^*\right)}$$

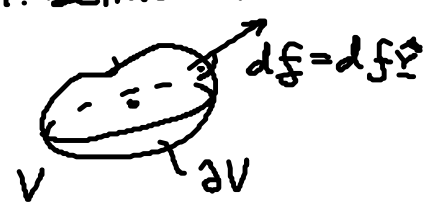
$$= \underline{\nabla}\cdot\left(\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*\right)$$

$$\longrightarrow \boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) + \operatorname{div} \underline{j}(\underline{r},t) = 0 \\ &\rho(\underline{r},t) = \psi^*\psi = |\psi(\underline{r},t)|^2 \ldots \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \\ &\underline{j}(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\underline{\nabla}\psi) - \psi(\underline{\nabla}\psi^*)\right] \ldots \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte} \end{aligned}} \quad (3.36)$$

... Kontinuitätsgleichung
für Wahrscheinlichkeitsdichte
≙ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße

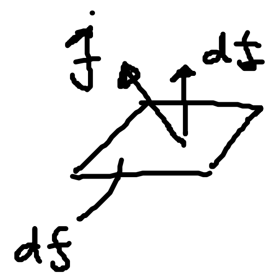
• Verdeutlichung:

1. Betrachte:



$$\frac{d}{dt}\left[\int_V d^3r\, \rho(\underline{r},t)\right] = \int_V d^3r\, \frac{\partial}{\partial t}\rho$$

$$\underset{(3.36)}{=} -\int d^3r\, \operatorname{div}\underline{j} \underset{\text{Gauß}}{=} \underbrace{-\oint d\underline{f}\cdot\underline{j}}_{\substack{\text{Wahrscheinlichkeit,}\\ \text{die aus V fließt}}} \quad (3.37)$$



$\underline{j}\cdot d\underline{f}$ ... Fluß von Wahrscheinlichkeit durch Fläche df

$\underline{j} \perp d\underline{f} \rightarrow$ kein Fluß

also: ρ = Erhaltungsgröße
$\underline{j}$ = Stromdichte

2. jetzt: $\underbrace{V}_{\text{von Kugel}} \rightarrow \infty$, Kugelkoordinaten: $d\underline{f} = r^2 d\Omega\, \underline{e}_r$ mit $r \rightarrow \infty$

ψ ist normiert $\rightarrow \psi < \frac{1}{r^{3/2}} \rightarrow j < \frac{1}{r^{3/2}}\frac{1}{r^{5/2}} = \frac{1}{r^4}$

$\longrightarrow d\underline{f}\,\underline{j} < \frac{1}{r^2} \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} 0$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dt}\left[\int_{V\to\infty} d^3r\, \rho(\underline{r},t)\right] = 0$$

Erhaltung der Norm $\Longrightarrow$ $$\boxed{\int d^3r\, \rho(\underline{r},0) = 1 \xrightarrow{SG} \int d^3r\, \rho(\underline{r},t) = 1} \quad (3.38)$$

... SG ist konsistent