

f) Gaußsches Wellenpaket (1dim)

• Def:
$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \bar{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}, \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad (3.24)$$

mit
$$\bar{\psi}(p) = A e^{-(p-p_0)^2/[4(\Delta p)^2]}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta p^2}}$$

Gauß-Verteilung
Normierung:
 $\int |\bar{\psi}(p)|^2 dp = 1!$

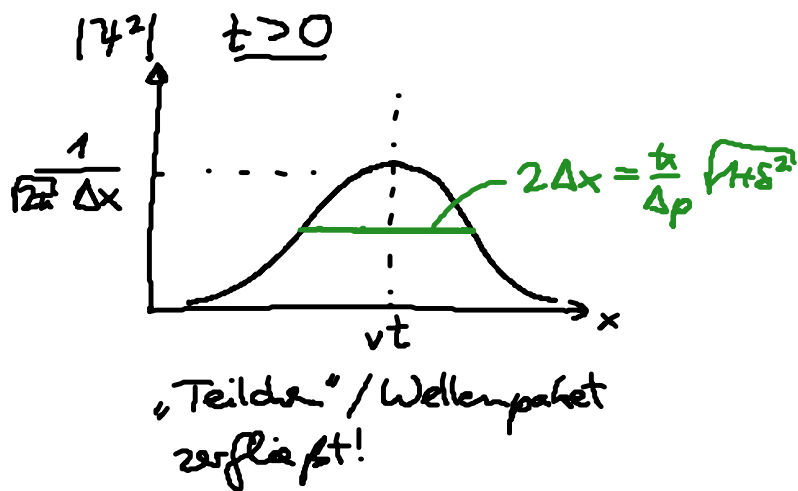
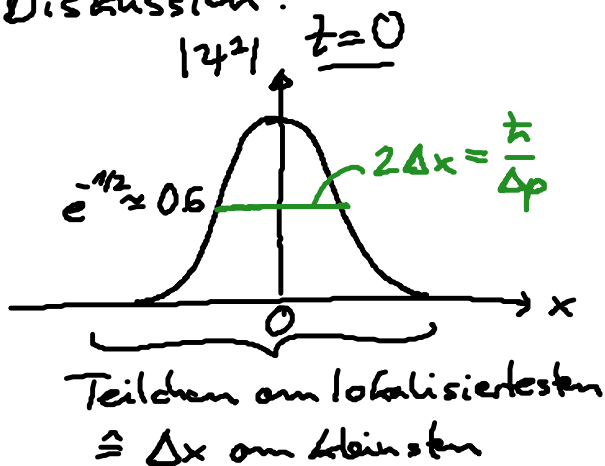
• Ausführung der FT in (3.24) $\rightarrow \psi(x,t)$.. komplexe Wellenfkt

$\Rightarrow |\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2(\Delta x)^2}} \quad \dots \text{Gauß-Verteilung!} \quad (3.26)$

mit $\langle x \rangle = vt, \quad v = \frac{p_0}{m}$

Unschärfe: $\Delta x = [\langle (x-vt)^2 \rangle]^{1/2} = \frac{\sqrt{1+S^2}}{2\Delta p/\hbar}$ mit $S = \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar m} t$

• Diskussion:



≙ Disperian

• Wichtig!

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

(i) Ort und Impuls können nicht gleichzeitig beliebig scharf gewählt werden → kein klassisches Teilchen

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

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

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

QT: Anwendung auf Welle-Teilchen-Dualismus

• Bsp:

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

≈ klassisches Teilchen

$$\rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta v}$$

$$= 10^{-24} \text{ m}$$

$$= \underline{10^{-16} \text{ Atomradien!!}}$$

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

1mm Sandkorn

(ii) mikroskopisches Teilchen:

e^- im Atom: $\Delta x = a_1 \stackrel{(2.12)}{=} 0,5 R \dots$ Bohrscher Radius

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

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

vgl. Bindungsenergie im H-Atom

$$|E_n| = R_y = 13 \text{ eV}$$

→ 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

$$E = \frac{p^2}{2m} =: H_0 \dots \text{„Hamiltonfkt.“ des freien Teilchens} \quad (3.28)$$

- Führe Operatoren ein: wirken auf Fktn. $f(x,t)$ [s. Kap. 4.16]

$$\begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \dots \text{„Energieoperator“} \\ p &\longrightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \dots \text{Impulsoperator} \end{aligned} \quad (3.29)$$

← sinnvolle Identifikation
s. Kap. 4.2 / 5.2

... Korrespondenz-Regel

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

... freie Hamiltonoperator

• damit:

$$E = H_0 \quad \frac{\text{Operatrange-}}{\text{wendet auf } \psi}$$

EES der
klass. Mechanik

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

... freie SG

b) allgemeine SG:

- Mitnahme von Potential $U(r)$?

- „Herleitung / Motivation“: Messiah, anschaulich
Nolting, über Hamilton-Jacobi

Formale Analogie zwischen

(i) Hamiltonsches Wirkprinzip
für klassisches Teilchen

$$\delta \int L dt = 0$$

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

mit $t = \frac{1}{\omega} \int_{r_1}^{r_2} \underline{k} \cdot d\underline{r} \quad \xrightarrow{\quad} \quad \frac{1}{c} \int_{r_1}^{r_2} n(\underline{r}) \underline{k} \cdot d\underline{r}$... Zeit um von r_1 nach r_2 zu gelangen

$\underline{k} = k \hat{k}$
 $k = \frac{2\pi}{\lambda} n$
 $c = \lambda \nu = \lambda \frac{\omega}{2\pi}$

Brechungsindex

Wellenl. für Licht \leftrightarrow Wellenl. für Materie

...

• direkte Korrespondenz-Regel

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

... allg. SG

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

mit $\underline{r} \rightarrow \hat{\underline{r}} = \underline{r}$ (3.32) \leftarrow siehe volle Identifikation s. Kap. 4.2/S.2

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

\rightarrow allgemeine Schrödinger-Gl.

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

• SG ist Dgl. 1. Ord. in t

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

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

$$d\psi(x,t) = dt \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(x,t)$$

$$\psi(x, t+dt) = \psi(x,t) + d\psi(x,t) !$$

weitere Bem:

(i) (3.31) gilt auch, wenn $A = A(t)$ (kein EES!)

(ii) geladene Teilchen im em. Feld

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

Achtung \rightarrow Reihenfolge $\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 - \underline{q} \hat{p} \cdot \underline{A} - \underline{q} \underline{A} \cdot \hat{p} + q^2 A^2] + q\varphi$

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

$$\rightarrow \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla} \cdot (\underline{A}\psi) + \underline{A} \cdot \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla} \psi$$

(iii) \wedge ... oft weggelassen

• Merkmal der QT:

- physikal. Größen/Observablen (Ort, Impuls, Energie) \rightarrow Operatoren (s. Kap. 4)
- wichtig: Kommutatoren von Operatoren

3.4 Kontinuitätsgleichung für $|\psi(x,t)|^2$

• Herleitung:

$$\left. \begin{aligned} \psi^* | i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x)) \psi |^* \\ \psi | -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x)) \psi^* \end{aligned} \right\} =$$

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

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

→ $\frac{\partial}{\partial t} \rho(r,t) + \text{div } j(r,t) = 0$ (3.36)

$\rho(r,t) = \psi^* \psi = |\psi(r,t)|^2 \dots$ Wahrscheinlichkeitsdichte

$j(r,t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* (\nabla \psi) - \psi (\nabla \psi^*)] \dots$ Wahrscheinlichkeitsstromdichte

... Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte
 $\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße

• Veranschaulichung:

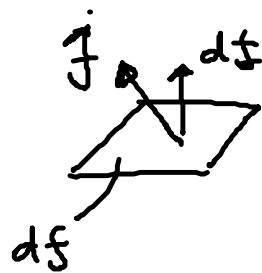
1. Betrachte:



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

$$\stackrel{(3.36)}{=} - \int_V d^3r \text{div } j = - \int_{\text{Grenz}} dS \cdot j \quad (3.37)$$

Wahrscheinlichkeit, die aus V fließt



$j \cdot dS \dots$ Fluss von Wahrscheinlichkeit durch Fläche dS
 $j \perp dS \rightarrow$ kein Fluss

also: $\rho =$ Erhaltungsgröße
 $j =$ Stromdichte

2. jetzt: $V \rightarrow \infty$ un-
von Kugel, Kugelkoordinaten: $dS = r^2 d\Omega e_r$ mit $r \rightarrow \infty$
 ψ ist normiert $\rightarrow \psi < \frac{1}{r^{3/2}} \rightarrow j < \frac{1}{r^{3/2}} \frac{1}{r^{5/2}} = \frac{1}{r^4}$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \left[\int_{V \rightarrow \infty} d^3r \rho(r,t) \right] = 0 \quad \rightarrow dS j < \frac{1}{r^2} \rightarrow 0 \quad r \rightarrow \infty$$

Erhaltung der Norm \Rightarrow

$$\int d^3r \rho(r,0) = 1 \xrightarrow{SG} \int d^3r \rho(r,t) = 1 \quad (3.38)$$

... SG ist konstant