

Frage: Bewegungsgleichung für Materiewellen (Wellenfunktion) $\psi(\underline{r}, t)$
(BWGL)

Anforderungen

(i) im kraftfreien Fall (Kein Potential)
sollen diese Wellen $\psi \propto e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ bzw.
Überlagerung davon Lösung der BWGL sein

(ii) Die Gleichung soll linear in ψ sein

\Rightarrow Wenn ψ_1 und ψ_2 Lösungen sind, dann ist auch
 $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ (mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$) Lösung!

"Superpositionsprinzip"

\Rightarrow Interferenzeffekte!

(iii) Gleichung ^{eine Differentialgleichung} soll 1. Ordnung in der Zeit sein

$\Rightarrow \psi(\underline{r}, t)$ vollständig durch die Anfangsbedingung
 $\psi(\underline{r}, t=0)$ festgelegt!

Betrachte zunächst "freie" Teilchen (Kein Potential, $V=0$)

und "probiere":

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} A e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} \\ &= -i\omega A e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} = -i\omega \psi(\underline{r}, t) \end{aligned}$$

Dispersionsrelation

$$= -i \hbar \frac{k^2}{2m} \psi(\underline{r}, t) \quad (*)$$

Ansatz: Skalar Divergenz Gradient

$$\Delta \psi(\underline{r}, t) = \nabla \cdot \nabla \psi = \nabla \cdot (i \underline{k} A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)})$$

Laplace

$$= i^2 \underline{k}^2 A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} = -k^2 A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

$$= -k^2 \psi(\underline{r}, t)$$

Vergleiche mit (*)

$$i \hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t)$$

Zeitabhängige Schrödingergleichung (SG)

für ein freies Teilchen

Bemerkungen

- Obige Gleichung ist linear in ψ , 1. Ordnung in der Zeit, und sie erhält das \Rightarrow Superpositionsprinzip

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

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (für Teilchen)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} &= \int d\underline{k} i\hbar (-i\omega) e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k}) \\
 &= \int d\underline{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(\underline{k}) e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d\underline{k} k^2 f(\underline{k}) e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left(e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k}) \right) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left(\int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k}) \right)
 \end{aligned}$$

⇒ Auch das Wellenpaket aus etw. Wellen erfüllt die SG für ein freies Teilchen

Umformulierung der SG (Kräftefreien Fall, $V=0$)

definiere

$$\hat{p} := \frac{\hbar}{i} \nabla$$

"Impulsoperator"

in der Ortsdarstellung

↳ noch zu definieren

"^" für Operator!

\hat{p} ist ein rechnerischer Operator

$$\hat{p} \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t) \stackrel{\psi = \text{ebene Welle}}{=} \frac{\hbar}{i} \nabla A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

Impulsoperator angewendet auf die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung

$$= \hbar \underline{k} A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

$$= p A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

$$= p \psi(\underline{r}, t) \quad (**)$$

man sagt:

ebene Wellen sind "Eigenfunktionen" des Impulsoperators!

$$\hat{p}^2 \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t) \right) \stackrel{(**)}{=} \frac{\hbar}{i} \nabla (p \psi(\underline{r}, t))$$

$$= \hbar^2 \Delta \psi(\underline{r}, t) = p \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t)$$

$$\stackrel{(**)}{=} p^2 \psi(\underline{r}, t)$$

also können wir identifizieren

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t) \stackrel{(**)}{=} \frac{p^2}{2m} \psi(\underline{r}, t)$$

$$\rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\underline{r}, t)$$

Einsetzen in die SG im kraftfreien Fall

wir hatten
$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\underline{r}, t)}$$

identifiziere

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_{\text{kin}}$$

„Hamilton-Operator“ eines nicht-relativist. Teilchens im kraftfreien Fall

analog zur kinetischen Energie in der klass. nicht-relativist. Mechanik

generell: \hat{H} sind immer Hamilton-Operatoren (Notation)

Beachte: \hat{H} ist immer skalare Operatoren

$$\text{z.B. } \hat{H}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p} \cdot \hat{p}) = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$$

mit $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ sind
diesem Komponenten des
Impulsoperators

also:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{kin}} \Psi(\underline{r}, t)$$

Schrödinger-Gl. für ein freies Teilchen

Formulierung in Annahme eines Potentials ?

(\Leftrightarrow einer (konservativen) Kraft ?)

Z.B. • harmonisches Potential (\rightarrow harmonischer Oszillator)

• Coulombpotential

$$V(\underline{r}) = V\left(\frac{|\underline{r}|}{r}\right) = -\frac{e^2}{r} \quad (e \text{ Elementarladung})$$

für ein Elektron im Kraftfeld
des positiv geladenen Kerns

Klassisch: Die „volle“ Hamiltonfunktion $H(q, p, t)$ / Ein-
dimensional
 ist dann $H = \underbrace{\int_{\text{Zun}} \dot{p}^2}_{\text{Kinische Energie}} + \underbrace{V(q, t)}_{\text{Potentielle Energie}}$
 $(H = T + V)$

QM: Definiere analog den „vollen“ Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \overset{\text{(Potential)}}{V(\hat{\underline{r}})}$$

$$\Leftrightarrow \hat{H} = \int_{\text{Zun}} \dot{p}^2 + V(\hat{\underline{r}}) \quad \uparrow \text{ Ortsoperator}$$

In dieser Form ist der Hamiltonoperator
 „darstellungunabhängig“

speziell „Ortsdarstellung“:

$$\hat{p} \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t)$$

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

\Rightarrow Vollständige Schrödingergleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\underline{r}, t)} \quad (*)$$

speziell \hat{H} darstellbar von \hat{H}

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\underline{r})$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r})$$

Bemerkungen zu (*)

- i) Die vollständige SG ist wie ^{anfangs} gefordert,
linear in ψ und eine DGL erster Ordnung in der Zeit
(und zweiter Ordnung im Ort \Rightarrow partielle DGL)

Aus $\psi(\underline{r}, t=0)$ (Anfangsbedingung)
folgt die Wellenfunktion zu allen späteren Zeiten

- ii) Bisher angedeutet: Konservativ Kräfte \Leftrightarrow Existenz eines Potentials V

In einigen Fällen ist eine Erweiterung auf
nicht-konservative Kräfte möglich!

Wichtig: Elektromagnetische Felder
z.B. interessiert man sich für die
Wirkung eines Magnetfeldes!

(Analogie zur Behandlung solcher Felder
in der klass. Mechanik durch generalisiertes Potential)

Außerdem: Es können prinzipiell auch zeitabhängige Potentiale
 $V(\underline{r}, t)$ behandelt werden!

(ii) Die Schrödingergl. ist im Grunde Resultat
von Plausibilitätsbetrachtungen (Kein exakte Herleitung!)

\Rightarrow SG ist eher als „Postulat“ zu sehen

(ähnlich wie die Newtonsche Axiome in der klass. Mechanik)

II.3. Kontinuitätsgleichung

Erinnerung:

$\underbrace{|\psi(\underline{r}, t)|^2}_{\substack{\text{Wahrsch.} \\ \text{dichte}}} d\underline{r}$: Wahrsch. dafür, dass sich das
Teilchen zu Zeit t im Volumenelement $d\underline{r}$
um \underline{r} aufhält

$$\int_{\substack{\uparrow \\ \text{ganzer Raum}}} |\psi(\underline{r}, t)|^2 d\underline{r} = 1$$

D.h. die
Wahrsch. bleibt
erhalten!

Frage: Wie ändert sich die Wahrscheinlichkeitsdichte
mit der Zeit?

Bearbeite Analogie zu anderen Gebieten in der Physik

z.B. Ladungstransport (Elektrodynamik)
oder Stromverlebe

$$\frac{\partial \rho(\underline{r}, t)}{\partial t} = - \nabla \cdot \underline{j}(\underline{r}, t)$$

Divergenz

Stromdichte

Kontinuitäts-
gleichung

Ladungsdichte
oder Massendichte in
einem strömenden Flüss.

Interpretation: Ändert sich die Dichte in einem Volumenelement,
so bedeutet das einen Fluss durch die Oberfläche
dieses Volumens (sieht man durch Integration der
Kontinuitätsgleichung über das Volumenelement)

⇔ Die gesamte Ladung bzw. Masse bleibt
erhalten!

z.B. Ladung = $\int_V d\underline{r} \rho(\underline{r}, t) = Q$
Gesamtladung

Auch für die Wahrscheinlichkeitsdichte in der QM
gibt es Erhaltungssatz ($\int_V d\underline{r} |\psi(\underline{r}, t)|^2 = 1$)

⇒ auch hier sollte Kontinuitätsgl. gelten!
mit $\rho(\underline{r}, t) = |\psi(\underline{r}, t)|^2$

Was ist in der QM die Stromdichte $\underline{j}(\underline{r}, t)$?

Benutze dazu die Schrödingergl.

$$\begin{aligned} \text{zunächst } \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{|\psi(r,t)|^2}_{S(r,t)} &= \frac{\partial}{\partial t} (\psi(r,t) \psi^*(r,t)) \\ &\stackrel{\text{Produktregel}}{=} \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{SG: } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H} \psi && \text{Potential } V(r) \\ &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}}_{\text{Ortsdifferential}} \Delta \psi + V \psi \\ \text{Komplex konjugiert: } -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \hat{H} \psi^* \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \end{aligned}$$

Dabei haben wir vorausgesetzt,
dass \hat{H} (Hamiltonoperator) reell ist

"o.k.", da \hat{H} (jedenfalls für konservativen System)
der Erhaltungsgesetz entspricht,
und Energie ist reell!

Einsetzen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{|\psi(\underline{r}, t)|^2}{g(\underline{r}, t)} = \left(\overbrace{-\frac{\hbar}{2im} \Delta \psi + \frac{V}{i\hbar} \psi}^{\frac{\partial \psi}{\partial t}} \right) \psi^* + \psi \left(\underbrace{\frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi^*}_{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}} \right)$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) + \frac{V}{i\hbar} (\psi \psi^* - \psi \psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{|\psi(\underline{r}, t)|^2}{g(\underline{r}, t)} = -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \quad (*)$$

Nehme die rechte Seite so um, dass eine Divergenz vorkommt (Analogie zur Kontinuitätsgleichung!)

benutze:

$$\begin{aligned} \text{Divergenz} \quad \nabla \cdot (\psi^* \overbrace{\nabla \psi}^{\text{Gradient}} - \psi \nabla \psi^*) &= \cancel{\nabla \psi^* \nabla \psi} + \psi^* \Delta \psi \\ &\quad - \cancel{\nabla \psi \nabla \psi^*} - \psi \Delta \psi^* \\ &= \psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* \end{aligned}$$

Also:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{|\psi(\underline{r}, t)|^2}{\rho(\underline{r}, t)} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$= -\nabla \cdot \hat{j}(\underline{r}, t)$$

mit der Stromdichte (in der Quantenmechanik)

$$\hat{j}(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Auch in der QM gibt es also ein Kontinuitätsgleichung!

Dies reflektiert die Erhaltung der Aufenthaltswahrscheinl.
eines Teilchens (integriert über den Raum)

Bem.: Die Stromdichte ist relevant z.B. bei Diskussion der Tunnel effekte

II.4. Erwartungswerte, Orts- und Impulsdarstellung

Aus der Interpretation von $|\psi(\underline{r}, t)|^2$ als Aufenthaltswahrscheinl. dichte

folgt:

Es lassen sich mit $|\psi|^2$ Mittelwerte und Schwankungen berechnen, ganz analog zur klass. Wahrscheinlichkeitslehre!

In der QM nennt man Mittelwert meist "Erwartungswert"

Behandle z.B. den Ort eines Teilchens

— nicht exakt voraussagbar wegen qu. Unschärfe

— aber man kann einen Erwartungswert angeben

≙ Ergebnis vieler Einzelmessung an sehr Teilchen

Definiere:

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} \rangle &= \int d\underline{r} \underbrace{|\psi(\underline{r}, t)|^2}_{\text{Dichte}} \underline{r} \\ &= \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}, t) \underline{r} \psi(\underline{r}, t) \end{aligned}$$

Erwartungswert des Ortes in der Ortsdarstellung