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

Anforderungen

(i) im kräftefreien Fall (kein Potential) sollen ebene Wellen $\psi \sim e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$ bzw. Überlagerungen davon Lösungen 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 soll $\overbrace{\text{1. Ordnung}}^{\text{eine Differentialgleichung}}$ in der Zeit sein

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

Betrachte zunächst "freies" Teilchen (kein Potential, $V=0$) und „probiere":

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \frac{\partial}{\partial t} \overset{\text{Konstante}}{A}\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$$

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

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

Dispersionsrelation

Andererseits:

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

Skalar, Divergenz, Gradient

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

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

Vergleiche mit $(*)$

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

Zeitabhängige <u>Schrödingergleichung</u> (SG)

für ein freies Teilchen

<u>Bemerkungen</u>

- Obige Gleichung ist offensichtlich linear in ψ, 1. Ordnung in der Zeit, und sie erfüllt das 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 $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (freie Teilchen)

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

$$= \int d\underline{k}\; \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(\underline{k})\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int d\underline{k}\; k^2 f(\underline{k})\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d\underline{k}\; \Delta\left(e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)} f(\underline{k})\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \int d\underline{k}\; e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)} f(\underline{k})$$

$\Rightarrow$ Auch das Wellenpaket aus ebenen Wellen erfüllt die SG für ein freies Teilchen

---

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

definiere

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

„Impulsoperator"
in der Ortsdarstellung
(noch zu definieren)

"$\wedge$" für Operator!

$\hat{p}$ ist ein vektorieller Operator

$\psi \hat{=}$ ebene Welle

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

Impulsoperator angewendet
auf die Wellenfunktion
in der Ortsdarstellung

man sagt:
ebene Wellen sind "Eigenfunktionen"
des Impulsoperators!

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

also können wir identifizieren

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

Einsetzen in die SG im kräftefreien Fall

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

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

identifiziere

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

„Hamilton-Operator" eines nicht-relativist. Teilchens im kräftefreien Fall

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

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

Beachte: $\hat{H}$ ist immer skalarer Operator

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

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

also:

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

Schrödingergl. für ein freies Teilchen

Formulierung in Anwesenheit eines Potential ?
(⇔ einer (konservativen) Kraft ?)

z.B. • harmonisches Potential (→ harmonischer Oszillator)

• Coulombpotential

$$V(\underline{r}) = V(\underbrace{|\underline{r}|}_{r}) = -\frac{e^2}{r}$$

(e Elementarladung)

für ein Elektron im Kraftfeld
des positiv geladenen Kerns

Klassisch: Die „volle" Hamiltonfunktion $H(q,p,t)$ | Eindimensional

ist dann $H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{Kinetische Energie}} + \underbrace{V(q,t)}_{\text{Potentielle Energie}}$

$$(H = T + V)$$

QM: Definiere analog den „vollen" Hamiltonoperator

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

Ortsoperator

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

In dieser Form ist der Hamiltonoperator „darstellungsunabhängig"

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

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

Spezielle Ortsdarstellung von $\hat{H}$

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

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

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 angedacht: Konservative Kräfte $\Leftrightarrow$ Existenz eines Potential 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 generalisierte Potential)

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

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

$\Rightarrow$ SG ist eher als „Postulat" zu sehen

(ähnlich wie die Newton'schen Axiome in der klass. Mechanik)

II.3. Kontinuitätsgleichung

Erinnerung:

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

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

V ganzer Raum

$\rightarrow$ D.h. die Wahrscheinl. bleibt erhalten!

Frage: Wie ändert sich die Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Zeit?

Beachte Analogie zu anderen Gebieten in der Physik

z.B. Ladungstransport (Elektrodynamik)
oder Strömungslehre

Divergenz

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

Kontinuitätsgleichung

Stromdichte

Ladungsdichte
oder Massendichte in einem strömenden Fluss.

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)

$\Longleftrightarrow$ 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 $\left(\int_V d\underline{r}\,|\psi(\underline{r},t)|^2 = 1\right)$

$\Longrightarrow$ 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.

zunächst
$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{|\psi(\underline{r},t)|^2}_{\rho(\underline{r},t)} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\psi(\underline{r},t)\,\psi^*(\underline{r},t)\right)$$
$$= \frac{\partial \psi}{\partial t}\psi^* + \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

Produktregel

SG:
$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi$$

Ortsdarstellung

Potential $V(\underline{r})$

Komplex Konjugieren:
$$-i\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H}\,\psi^*$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*$$

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

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

Einsetzen:

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

$$+ \psi \underbrace{\left(\frac{\hbar}{2mi}\Delta\psi^* - \frac{V}{i\hbar}\psi^*\right)}_{\frac{\partial\psi^*}{\partial t}}$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right)$$

$$+ \cancel{\frac{V}{i\hbar}\left(\psi\psi^* - \psi\psi^*\right)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{|\psi(\underline{r},t)|^2}_{\rho(\underline{r},t)} = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right) \quad (*)$$

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

benutze:

$$\underset{\text{Divergenz}}{\nabla\cdot}\left(\psi^* \overset{\text{Gradient}}{\nabla\psi} - \psi\nabla\psi^*\right) = \cancel{\nabla\psi^*\nabla\psi} + \psi^*\Delta\psi$$

$$\cancel{-\nabla\psi\nabla\psi^*} - \psi\Delta\psi^*)$$

$$= \psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*$$

Also:

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

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

mit der Stromdichte (in der Quantenmechanik)

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

Auch in der QM gibt es also eine Kontinuitätsgleichung!

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

Bem.: Die Stromdichte ist relevant z.B. bei Diskussion des Tunneleffekts

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. Wahrscheinlichkeitstheorie!

In der QM nennt man Mittelwert meist „Erwartungswerte"

Betrachte z.B. den Ort eines Teilchens

— nicht exakt voraussagbar wegen qm. Unschärfe

— aber man kann einen Erwartungswert angeben
$\hat{=}$ Ergebnis vieler Einzelmessungen am selben Teilchen

Definiere:

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

Erwartungswert des Ortes in der Ortsdarstellung