4. Impulswahrscheinlichkeitsdichte

bisher Mittelwerte über Ort : $\langle f(\vec{r})\rangle = \int d^3r\, f(\vec{r})\, |\Psi(\vec{r},t)|^2$

Frage: zweite Kenngröße der Mechanik ist Impuls $\vec{p}$,
wie gestaltet sich Impulsmittlung $\langle g(\vec{p})\rangle = ?$

definieren Fouriertransformierte : $\hat{\Psi}(\vec{k},t) = \int d^3r\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, \Psi(\vec{r},t)$

mit $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ $\quad \leadsto \quad \hat{\Psi}(\vec{p},t) = \int d^3r\, e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}\, \Psi(\vec{r},t)$

Parseval theorem : $\quad 1 = \int d^3r\, |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\, |\hat{\Psi}(\vec{k},t)|^2$

(1799, frz. Mathematiker) $\quad \nearrow$ ganzer Raum

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \leadsto \quad \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{\hbar^3}\int d^3p\, \left|\hat{\Psi}(\vec{p},t)\right|^2 = 1$$

Impulswahrscheinlichkeitsdichte $\quad f(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\,|\hat{\Psi}(\vec{p},t)|^2$

Mittelwert berechenbar:

$$\langle A\rangle = \sum_n w_n A_n \quad \leftarrow \text{Realisierungen}$$

$\nearrow$ Wahrscheinlichkeit

QM: $\quad \langle A(\vec{r})\rangle = \int d^3r\, |\Psi(\vec{r},t)|^2 A(\vec{r})$ $\qquad n \leftrightarrow \vec{r}$

$\qquad \langle B(\vec{p})\rangle = \int d^3p\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}|\hat{\Psi}(\vec{p},t)|^2\, B(\vec{p})$

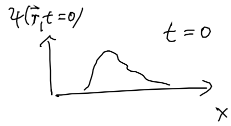
5. Schrödingergleichung im freien Raum : Wellenpakete

Schrödingergleichung: $\quad i\hbar\,\partial_t \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t)$, $\quad \Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$

lineare Dgl $\rightarrow$ Lösung im Fourierraum

Ansatz: $\Psi(\vec r, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \, e^{i\vec k \cdot \vec r} \, \hat\Psi(\vec k, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \, e^{i\vec k \cdot \vec r - i\omega(\vec k) t} \, \hat\Psi(\vec k)$

Anfangsbedingg.: vorgeben von $\Psi(\vec r, t=0)$



Lösung:

a) Sinnhaftigkeit d. Ansatzes: Dispersionsrelation

einsetzen in Schrödingergleichung ergibt:

$$\partial_t \Psi \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, \underbrace{e^{i\vec k \cdot \vec r - i\omega(k) t}} \, \left(-i\omega(k) \, \hat\Psi(k)\right)$$

$$\Delta \Psi \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad " \quad \left(-|\vec k|^2 \, \hat\Psi(k)\right)$$

einsetzen in Schrödingergl.:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, e^{i\vec k \cdot \vec r - i\omega(k) t} \underbrace{\left(i\hbar \, (-i\omega(k)) + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (-|\vec k|^2) \right)}_{=0} \hat\Psi(k) = 0$$

$$\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec k|^2$$

$$\boxed{\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} |\vec k|^2}$$ Dispersionsrelation der Schrödingergleichung

wichtig $\omega \sim |k|^2$, konträr zu Lichtwelle: $\omega_L \sim |k|$

zu erwarten ist sehr unterschiedliches Verhalten:

Lichtwelle:

$E(x,t) \sim \int dk \, f(k) \, e^{i(kx - \omega_L(k) t)}$

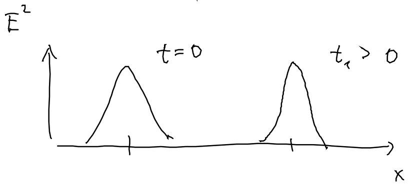
mit $\omega_L = ck$ $\sim \int dk \, f(k) \, e^{ik(x - ct)}$

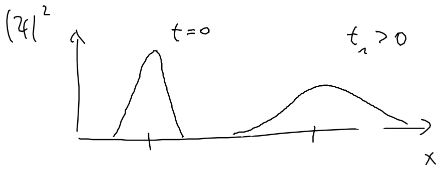
Schrödingerwelle:

$\Psi(x,t) \sim \int dk \, f(k) \, e^{i(kx - \omega(k) t)}$

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\sim \int dk \, f(k) \, e^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m} t)}$

$x-ct$: forminvariante Ausbreitung $\qquad$ Ψ: unterschiedliche Geschwindigkeit f. einzelne Beiträge





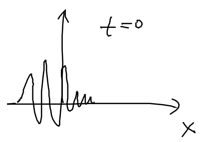
Kein forminvariante Ausbreitung

Integralformel f. Wellenpaketausbreitung (eindimensional)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^n e^{-px^2} e^{-qx} = (-1)^n \left(\frac{\pi}{p}\right)^{1/2} \frac{\partial^n}{\partial q^n} e^{\frac{q^2}{4p}}$$

<u>Idee</u> : zunächst $\hat{\Psi}(k)$ bestimmen, dazu $\hat{\Psi}(\vec{r}, t=0)$ Fouriertransformieren

Ausführung f. 1d-Wellenpaket mit $\Psi(x,t=0) = A\, \underbrace{e^{-\left(\frac{1}{\sigma^2}+i\alpha\right)x^2}}_{\text{Phasenmodulierte Gaußkurve}}\, \underbrace{e^{ik_0 x}}_{\text{Anfangsimpuls } \hbar k_0}$



α, σ Konstant, reell

A : Normierungskonstante

b) Normierung von $\Psi(x,0)$ berechnen: $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x,0)|^2 \overset{!}{=} 1$

$$|A|^2 \int dx\, e^{-\frac{2x^2}{\sigma^2}} \overset{!}{=} 1 \quad \longrightarrow \quad |A|^2 = \left(\frac{2}{\sigma^2 \pi}\right)^{1/2}$$

c) Bestimmung von $\hat{\Psi}(k)$:

$$\hat{\Psi}(k) = A \int dx\, e^{-x^2 \underbrace{\left(\frac{1}{\sigma^2}+i\alpha\right)}_{\beta}} e^{-i(k-k_0)x} = A \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\beta}}$$

Impulsverteilung ist um k_0 lokalisiert

d) Bestimmung von $\Psi(x,t)$, $|\Psi(x,t)|^2$:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{ikx - i\omega(k)t}\,\hat{\psi}(k), \quad \hat{\psi}(k) \text{ aus (c)}$$

$$= A\, e^{-k_0^2/4\beta}\left|1 + i\frac{2\hbar\beta}{m}t\right|^{1/2} e^{-\frac{\beta\left(x - ik_0/(2\beta)\right)^2}{1+i\frac{2\hbar\beta}{m}t}}$$

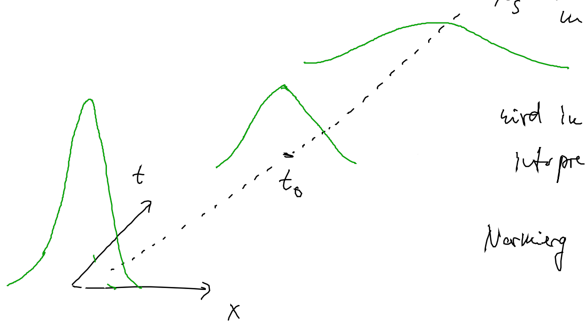
$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2\gamma^2(t)}\right)^{1/2}\cdot e^{-\frac{2}{\sigma^2\gamma^2(t)}\cdot\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}$$

$$\text{mit } \gamma^2(t) = \left(1 - \frac{2\hbar\alpha}{m}t\right)^2 + \left(\frac{2\hbar}{m\sigma^2}t\right)^2$$

Bemerkungen:

i) Wellenpaket $t \neq 0$, wieder ein Gaußfunktion in x, aber mit zeitlich verschobenem Maximum und einer Breite $\gamma(t)$ die zeitlich variiert

$\alpha = 0$: (üA $\alpha \neq 0$)



Klassische Bahnkurve:

$$x_s = \frac{\hbar k_0}{m}t = v_0 t$$

wird im Sinne der Wahrscheinlichkeitsinterpretation verbreitert (Streuung d. Messwerte)

Normierung (Fläche) bleibt 1

ii) typische Zeit t_0 f. Verbreiterung wenn $\gamma^2 \approx 2$

$$1 = \frac{2\hbar}{m\sigma^2}t_0 \qquad t_0 = \frac{m\sigma^2}{2\hbar}$$

makroskop. Körper: $m = 0{,}1\,g$, $\sigma = 10^{-6}\,m = 1\,\mu m \to 10^{10}$ Jahre

atomare Körper $m = 10^{-30}\,kg$, $\sigma = 10^{-6}\,m = 1\,\mu m \to 10^{-8}\,s$

im Rahmen der Messgenauigkeit bei makroskop. Körpern vernachlässigbar

e/ Abweichung vom Ortsmittelwert

Abweichg. um $x_S = \frac{\hbar k_0}{m} t$

$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\sigma^2 \gamma^2(t)}{4}$$

f/ Abweichung vom Impulsmittelwert

Abweichg. um $k_0 \cdot \hbar$

$$\Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{\sigma^2} (1 + \alpha^2 \sigma^4)$$

Unschärfeprodukt $\quad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \gamma(t) (1 + \alpha^2 \sigma^4)^{1/2}$

Produkt v. Orts- und Impulsunschärfe gibt immer den bestimmten Wert

1. Grenzfall $\alpha = 0$. $\quad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \left(1 + \left(\frac{2\hbar}{m\sigma^2} t \right)^2 \right)^{1/2}$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Heisenbergsche Unschärferelation}}$$

2. Grenzfall $\alpha \neq 0$ $\quad$ ÜA führt auch auf $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Bemerkungen zur Unschärfe:

i/ verkleinert man Ortsunschärfe (Spalt kleiner $\hat{=}$ genauer Ort festlegen)
so erhöht man die Impulsunschärfe (Photostreifen $\hat{=}$ weniger genau Impuls festlegen)

ii/ Ort und Impuls eines Quants können nicht gleichzeitig beliebig genau festgelegt werden
bzw. die Begriffe verlieren ihren Sinn

iii/ Welle-Teilchen Dualismus (Bohr):
beide Aspekte sind enthalten in Bornschen Postulaten

$$p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \Rightarrow dp = -\hbar 2\pi \frac{d\lambda}{\lambda^2}$$ Impulsunschärfe

$$\Delta x \cdot \Delta p = \Delta x \cdot \frac{\hbar 2\pi \Delta\lambda}{\lambda^2} \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \underbrace{\frac{\Delta x}{\lambda_B}}_{1} \cdot \underbrace{\frac{\Delta\lambda}{\lambda_B}}_{2} \geq \frac{1}{4\pi} = \text{konst}$$

1 Maß für „Teilchenartigkeit" 2 Maß f. die „Wellenartigkeit"