e) Gruppengeschwindigkeit:

- Methode der stationären Phase:

$$\boxed{\nabla_{\underline{p}}\left(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et + \hbar\alpha\right)\Big|_{\underline{p}_0} = 0} \quad (3.21)$$

wobei $\psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} |\bar{\psi}(p)| e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et + \hbar\alpha)}$

Maximum/Zentrum von $\psi(\underline{r},t)$:

$$\boxed{\begin{aligned} &\underline{r}_m = \underline{v}_{gr} t + \underline{r}_0 \\ &\text{mit } \underline{r}_0 = -\hbar \nabla_{\underline{p}} \alpha(\underline{p})\Big|_{\underline{p}_0}\end{aligned}} \quad (3.22)$$

$$\boxed{\underline{v}_{gr} \overset{!}{=} \nabla_{\underline{p}} E(\underline{p})\Big|_{\underline{p}_0} = \nabla_{\underline{k}}\, \omega(\underline{k})\Big|_{\underline{p}_0 = \hbar \underline{k}_0}} \quad (3.23)$$

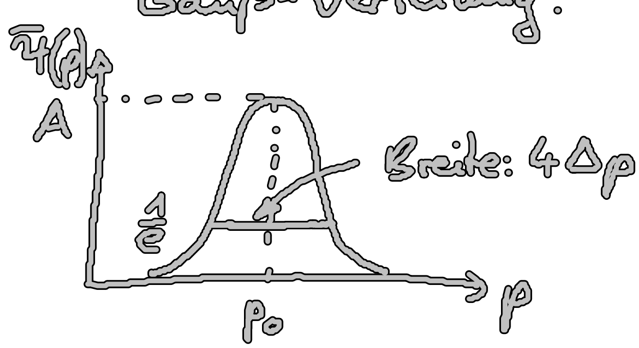
$\underline{v}_{gr} \overset{!}{=} \underline{v}$

... Gruppengeschw.
$\hat{=}$ „Geschw. des Teilchens"

f) Gaußsches Wellenpaket (1 dim): wichtig! zur Illustration

Def:

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



• Diskussion, Beweis: s. Übungen

• Mittelwerte: Impuls

$$\left.\begin{array}{l} \langle p\rangle \overset{(3.13)}{=} p_0 \\ \text{Unschärfe: } \left[\langle (p-p_0)^2\rangle\right]^{1/2} = \Delta p \end{array}\right\} (3.25)$$

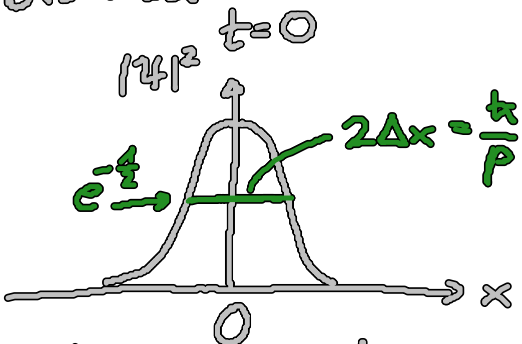
• Ausführung FT in (3.24) $\longrightarrow \psi(x,t)$ (komplexe Gauß-Fkt)

Re ψ, Im ψ s. Applet

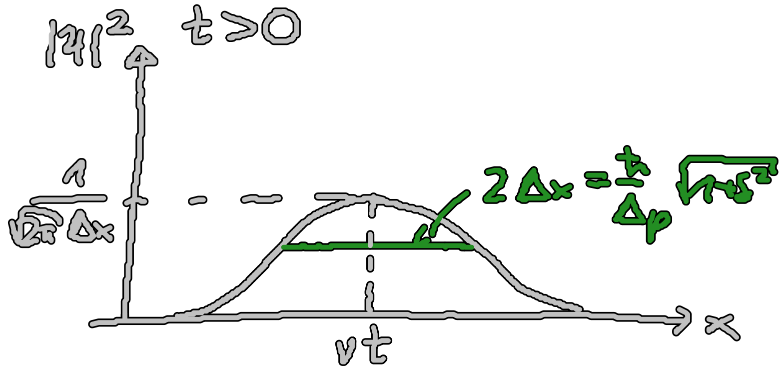
$\Longrightarrow$

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

• Diskussion:



Teilchen am lokalisiertesten
≙ Δx am kleinsten



„Teilchen"/Wellenpaket zerfließt
≙ Dispersion

• wichtig!

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

(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 allgemeingültig 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

- Bsp: (i) makroskopisches Teilchen:
≈ klassisches Teilchen

$\Delta v = 10^{-4}\frac{m}{s} \to \Delta x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta v} = 10^{-24}\,m$
$= 10^{-14}$ Atomradien
$m = 10^{-6}\,kg$
1mm Sandkorn

(ii) mikroskop. Teilchen:
e^- im Atom: $\Delta x = a_1 = 0.5\,Å$ ... Bohrscher Radius

$\to \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = 10^{-24}\frac{kg\,m}{s} \to \Delta E = \frac{\Delta p^2}{2m_e} = 4\,eV$

e^- kein klass. Teilchen,
verschmiert über Atom
[vgl. Bindungsenergie im H-Atom: $|E_1| = R_y = 13\,eV$]

3.3. Die Schrödinger-Gleichung (SG)

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

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

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

- Führe Operatoren ein: wirken auf Fktn. $f(\underline{r},t)$ [s. Kap. 4.16]

$$\boxed{\begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \text{.... "Energieoperator"} \\ \underline{p} &\longrightarrow \hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} \quad \text{... Impulsoperator} \end{aligned}}$$ (3.29) ← sinnvoll Kap. 4.2/5.2

... Korrespondenzregel

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

... freie Hamiltonoperator

- damit:

$$\underset{\text{EES der klass. Mech.}}{E = H_0} \xrightarrow[\text{angewendet auf } \Psi]{\text{Operatoren}} \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\underline{r},t) = \hat{H}_0\Psi \underset{(3.30)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\Psi(\underline{r},t)$$

... freie SG

b) <u>allgemeine SG</u>

- 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 klass. Teilchen

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

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

$$t = \frac{1}{\omega}\int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2}\underline{k}\cdot d\underline{r} \underset{\substack{k=\frac{2\pi n}{\lambda} \\ c=\lambda\nu}}{=} \frac{1}{c}\int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} \underset{\text{Brechungsindex}}{n(\underline{r})}\,\hat{\underline{k}}\cdot d\underline{r}$$

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

- direkter: <u>Korrespondenzregel</u>

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

... allg. SG

- Hamiltonfkt: $H = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{U(r)}_{\text{potentielle Energie}}$

mit $\boxed{\underline{r} \longrightarrow \hat{\underline{r}} = \underline{r}}$ (3.32) sinnvolle Identifikation s. Kap. 4.2/5.2

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

→ allgemeine SG:

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

- SG ist Dgl. 1. Ord. in t:

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

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

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

$$\psi(\underline{r},t+dt) = \psi(\underline{r},t) + d\psi(\underline{r},t)$$

- weitere Bem.:

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

  (ii) geladenes Teilchen im em-Feld

$$H = \frac{1}{2m}\left(\underline{p} - q\underline{A}(\underline{r},t)\right)^2 + q\varphi(\underline{r},t) \quad (3.35)$$

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

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

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

  (iii) ^ ... oft weggelassen

- Merkmal der QT:

  - physikal. Größen/Observablen (Ort, Impuls, Energie)

    → Operatoren (s. Kap. 4)

  - wichtig: Kommutatoren von Operatoren

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

· Herleitung:

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

$$\psi \,\Big|\; -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})\right)\psi^*$$

$\ominus$

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

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

$$\boxed{\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) + \operatorname{div}\underline{j}(\underline{r},t) = 0\\ &\rho(\underline{r},t) = \psi^*\psi = |\psi(\underline{r},t)|^2 \ldots \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}\\ &\underline{j}(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*\right] \ldots \text{Wahrscheinl.-keitsstromdichte}\end{aligned}} \quad (3.26)$$

… Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte

$\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße