# II Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

- Schrödingergl. (Sgl.): $i\hbar\,\partial_t \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t)$

- Wahrscheinlichkeits-Interpretation (Born): $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ ist Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AW)

## 1. Wellenpaketdynamik

- Frage: Wie bewegen sich qm Teilchen, die als Materiewellen $\Psi(\vec{r},t)$ beschrieben werden von Ort $a \to b$? Was passiert mit $\Omega$?

- Ansatz für lokalisierten Zustand:

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\, \Psi(\vec{k})}_{(a)}\, \underbrace{e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega(\vec{k})t)}}_{(b)}}$$

- Bemerkungen:

(a) Superposition (Überlagerung) von ebenen Wellen mit Amplitudenverteilung $\Psi(\vec{k})$

(b) ebene Welle mit Dispersionsrelation $\omega = \omega(\vec{k})$, muß bestimmt werden (analog Lichtwellen $\omega(\vec{k}) = c \cdot |\vec{k}|$ )

(c) $\hat{\Psi}(\vec{k})$ ist Fouriertransformierte von $\Psi(\vec{r})$

→ allgem.: $f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \hat{f}(k)\, e^{ikx}$

analog: $f(x) = \sum_k f_k\, \varphi_k(x)$

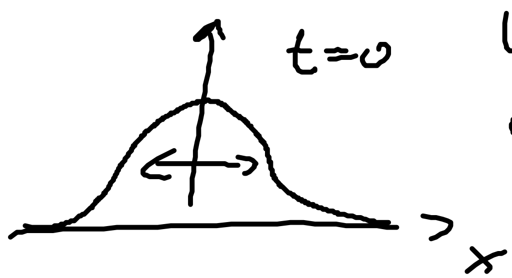
$\sim \int dk\, \hat{f}(k)\, e^{ikx}$

(d) da die Sgl. eine lineare Dgl. ist, sind Überlagerungen von ebenen Wellen mit verschiedenen $\vec{k}$ auch Lsg.

## 1.1 Zerfließen eines Wellenpakets (1d Problem)

- Anfangsverteilung: $\Psi(x,0) = A \cdot e^{-x^2/\sigma^2}$

Gauß:




lokalisiertes $\Psi$ mit der Breite $\sigma$

- Frage: Wie entwickelt sich $\Psi$ ?

- Ansatz: $\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty} dk\, \hat{\Psi}(k)\, e^{i(kx - \omega(k)t)}$ (#)

k in x-Richtung

(a) Normierungskonstante A bestimmen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |\Psi(x,0)|^2 \stackrel{!}{=} 1$$ muß gelten für Wahrscheinlichkeit

⋮

$$\xrightarrow{\text{ÜB}} \Psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \sigma^{-1/2} e^{-x^2/\sigma^2}$$

(b) Berechnen von $\hat{\Psi}(k)$ aus $\Psi(x,0)$:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{2\pi} \int dk \, \hat{\Psi}(k) \, e^{ikx} \qquad (t=0)$$

$$\hat{\Psi}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-ikx} \Psi(x,0) \qquad \left(\begin{array}{c}\text{Fourier-}\\\text{umkehrung}\end{array}\right)$$

⋮

$$\xrightarrow{\text{ÜB}} \hat{\Psi}(k) = \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \sigma^{1/2} e^{-k^2\sigma^2/4}$$

(c) Berechnen von $\omega(k)$

Einsetzen von Ansatz (#) in Sgl.

lhs: $$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = i\hbar \frac{1}{2\pi} \int dk \, \hat{\Psi}(k) \left[-i\omega(k)\right] e^{i(kx-\omega(k)t)}$$

rhs: $$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x,t) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{2m} \int dk \, \hat{\Psi}(k) \left[ik\right]^2 e^{i(kx-\omega(k)t)}$$

$$\text{lhs} - \text{rhs} = \frac{1}{2\pi}\int dk\, \hat{\Psi}(k)\left[\hbar\omega(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right]\underbrace{e^{i(kx-\omega(k)t)}} \overset{!}{=} 0$$

Da $\{e^{ikx}\}$ linear unabhäng. Funktionensystem

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

Dispersionsrelation für ein freies, qm behandeltes Teilchen

(Beziehung, die die Frequenz der Welle mit der Wellenzahl verknüpft)

(d) Berechnen des propagierenden Wellenpakets

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int dk\, \hat{\Psi}(k)\, e^{i(kx-\omega(k)t)}$$

$$= \ldots$$

$$\xrightarrow{\text{ÜB}} \Psi(x,t) = B\left[\frac{\pi}{c(t)}\right]^{1/2}\frac{2}{\sigma}\, e^{-\frac{x^2}{\sigma^2 c(t)}}$$

$$\text{mit } B = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}\sigma^{1/2}$$

$$c(t) = 1 + i\,\frac{2\hbar t}{m\sigma^2}$$

- Interpretation:

Die Aufenthaltsw. des Teilchens $|\Psi(x,t)|^2$ verändert sich mit zunehmender Zeit $t$:

$$|\Psi(x,t)|^2 \overset{ÜB}{=} \ldots = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\Delta(t)} e^{-\frac{2x^2}{\Delta^2(t)}}$$

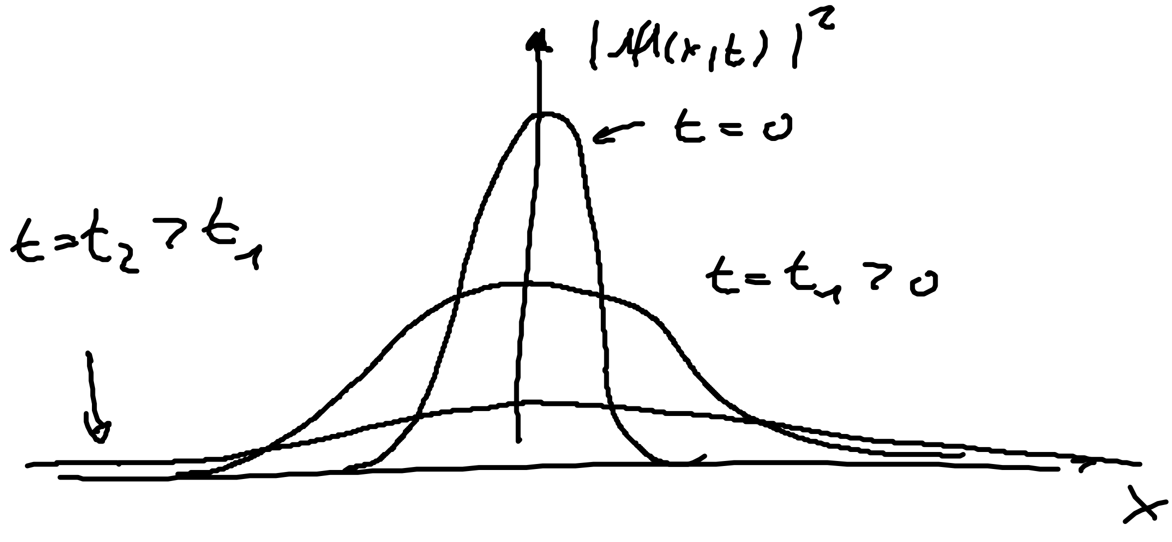
mit $\Delta(t) = \sigma\,|c(t)|$

- Die AW ist ein Gaußpaket ($\sim e^{-x^2}$) mit
  (1) zeitabhängigen Breiten
  (2) zeitabhängigen Amplitude

- Normierung ist erfüllt (zeigen auf ÜB)
- Ort-Zeit-Dynamik des Teilchens:

$$\Delta(t) = \sigma \cdot \left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2\sigma^4}\right)^{1/2}$$
$$= \sigma\,(1 + \delta^2(t))^{1/2}$$

Breite des WP wächst mit der Zeit an ($\delta \sim t$)




- Fläche bleibt erhalten ($\sim$ Wahr. das Teilchen irgendwo im Raum zu finden)

- Offensichtlich ist der Begriff der „Bahnkurve" nicht mehr wohldefiniert

(klass. Teilchen $x=0\ \forall t$ , hier „Verwaschung")

## 1.2 Quantenmechanische Mittelwerte am Bsp. der Wellenpaket-Ausbreitung

- Wdh: Wahr. rechnung

$$\underbrace{\langle A \rangle}_{\text{Mittelwert einer stat. Größe}} = \sum_n \underbrace{w_n}_{\text{W. des Ereignisses } A_n} \underbrace{A_n}_{\text{mgl. Wert von } A} \ \underset{\text{kontinuierl. Variablen}}{\hat{=}} \ \int dA\, w(A)\, A$$

- Bsp.: Würfel $w_n = \frac{1}{6}$ $A_n = 1, \dots, 6$

$$\langle A \rangle = 3{,}5$$

Die W. interpretation von $|\Psi(x,t)|^2$ erlaubt uns stat. Mittelwerte zu berechnen

(a) mittlerer Ort

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \underbrace{|\Psi(x,t)|^2}_{\rho(x,t)} \cdot x = 0$$

(ungerade Fkt)

→ Schwerpunkt des Wellenpakets (WP) bleibt immer bei $x=0$

(b) mittlere Schwankungsquadrat

$\langle (\Delta x)^2 \rangle$ = Standartabweichung

$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ = mittlere Streuung des Meßwertes $x$ um den Mittelwert $\langle x \rangle$

$$\langle (x - \underbrace{\langle x \rangle}_{=0})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |\Psi(x,t)|^2 x^2$$

$$= \ldots \quad \text{ÜB}$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{1}{4} \sigma^2 \Big(1 + \underbrace{\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma^4}}_{\delta^2}\Big)$$

mittlere Schwankungsquadrat der Ortskoordinate für WP-Ausbreitung.

(c) „Ortsunschärfe" des Teilchens ist $\Delta x$!

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} = \frac{\sigma}{2} \left(1 + \delta^2(t)\right)^{1/2}$$

wie „breit" ist das WP um $\langle x \rangle$ verteilt.

$$\boxed{\Delta x \geq \frac{\sigma}{2}}$$ untere Abschätzung für Ortsunschärfe

$\frac{\sigma}{2}$ ist die Ortsunschärfe bei $t=0$ und somit durch die AB gegeben.

Das Anwachsen der Ortsunschärfe mit der Zeit ist typ. qm. Effekt.

· Frage: Für welche Teilchen ist QM wichtig?

$\longrightarrow$ wann ist $\delta^2 \approx 1$ $\longrightarrow$ signifikante Verbreiterung

$\delta = 1 \implies t_B = \frac{\delta m \sigma^2}{2\hbar}$ Zeit nach der merkliche Verbreiterung auftritt

(1) makroskopischer Körper: $m = 0{,}1\,g$, $\underbrace{\sigma = 10^{-6}\,m = 1\,\mu m}_{\text{Meßungenauigkeit zu Beginn}}$

$$t_B = \frac{\delta m \sigma^2}{2\hbar}$$

$$= \frac{1 \cdot 0{,}1 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-12}}{2 \cdot 10^{-34}} \approx 10^{18}\,s$$

$\approx 10^{10}$ Jahre

$\longrightarrow$ im Rahmen der Meßungenauigkeit <u>keine</u> Verbreiterung feststellen

(2) Elektron: $m \approx 10^{-30}\,kg$, $\underbrace{\sigma = 10^{-6} = 1\,\mu m}_{\text{Meßung. zu Beginn}}$

$$t_B = \frac{1 \cdot 10^{-30} \cdot 10^{-12}}{2 \cdot 10^{-34}}.$$

Die elektronische Aufenthaltsw. verbreitert sich extrem schnell.

$$t_B \approx 10^{-8}\,s$$

$\implies$ QM relevant

Es gibt dramatische Unterschiede zwischen Makro- und Mikroteilchen (Masse)!

- Achtung: konkret untersuchte Prozess ist wichtig

z.B.: Rutherfordstreuung

α-Teilchen durchlaufen die Atomkerne sehr schnell, Verbreiterung gering, so daß entsprechende Stoß klassisch behandelt werden kann!

## 1.3 Impulsraum am Bsp. der WP Bewegung

- Motivation: klass. Mechanik $\vec{r}, \vec{p}$

wie ist das in der QM?

W. verteilung im Ortsraum: $\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$

- Frage: Wie lautet die W. ein Teilchen in einem bestimmten Impulszustand $\vec{p}$ zu finden

$= (\rho(\vec{p},t))$ ?

$$\psi(\vec r,t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec k\, \hat\psi(\vec k,t)\, e^{i\vec k\cdot\vec r} = \left|\begin{array}{l}\vec p = \hbar\vec k\\ \text{Übergang zu}\\ \text{Impulsvariable}\end{array}\right|$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\,\hat\psi(\vec p,t)\, e^{i\vec p\cdot\vec r/\hbar}$$

stellen $\int \rho(\vec r,t)\, d^3r$ im Impulsraum darstellen:

$$\int \rho(\vec r,t)\, d^3r = \int d^3r\, \underbrace{\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\hat\psi(\vec p,t) e^{\frac{i\vec p\cdot\vec r}{\hbar}}}_{\psi(\vec r,t)} \cdot \underbrace{\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\hat\psi^*(\vec p',t) e^{-\frac{i\vec p'\cdot\vec r}{\hbar}}}_{\psi^*(\vec r,t)}$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\hat\psi(\vec p,t)\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\hat\psi^*(\vec p',t)\, \underbrace{\int d^3r\, e^{i(\vec p-\vec p')\cdot\vec r/\hbar}}_{(2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec p-\vec p')}$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left|\hat\psi(\vec p,t)\right|^2$$

- Bsp.: Wellenpaket (1d: $\vec p \to p_x \to p$ )

$$\hat\rho(p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)}\left|\hat\psi(p,t)\right|^2 \qquad \hat\psi(k,t) = \hat\psi(k)\, e^{-i\omega(k)t}$$

$\vdots$

$$\xrightarrow{\text{ÜB}} \boxed{\hat\rho(p,t) = \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\sigma}{\hbar}\, e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2}}}$$

W. verteilung im Impulsraum

(a) mittlerer Impuls

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \hat{\varrho}(p,t) \cdot p = 0$$ Integral über ungerade Fkt

(b) Schwankung: ÜB

$$\langle (p - \underbrace{\langle p \rangle}_{0})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \hat{\varrho}(p,t)\, p^2$$

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2/\sigma^2$$

(c) Maß für die Impulsunschärfe

$$\boxed{\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}}$$

## 1.4 Heisenberg'sche Unschärferelation am Bsp WP. Bewegung

- Frage: Was können wir aus der mittleren Orts- und Impulsunschärfe lernen?

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\sigma}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sigma} = \frac{\hbar}{2}$$ unabhängig von $\sigma$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$ Heisenberg-Unschärfe Relation zwischen Ort und Impuls

- Bemerkungen:

(a) verkleinert man Ortsunschärfe (also messen genauer) so erhöht sich auf Grund der Ungl. die Impulsunschärfe

(b) Ort und Impuls eines qm Teilchens können <u>nicht</u> gleichzeitig beliebig genau festgelegt werden

(c) Gegensatz zur klass. Physik , wo man Ort und Impuls eines Massepunktes bel. genau festlegen kann

(d) Welle - Teilchen - Dualismus Dokumentation

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

$$\Delta x \cdot \Delta\lambda \geq \frac{\lambda^2}{4\pi}$$

$$\frac{\Delta x}{\lambda_B} \cdot \frac{\Delta\lambda}{\lambda_B} \geq \text{konstante}$$

$\frac{\Delta x}{\lambda_B}$ - Maß für Teilchenartigkeit

$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_B}$ - Maß für die Wellenartigkeit