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 Ω?

- 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) $\hat{\psi}(\hat{k})$ ist Fouriertransformierte von $\psi(\vec{r})$

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

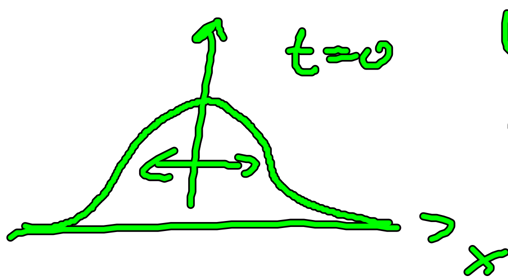
analog: $$f(x) = \sum_k f_k \, \varphi_k(x)$$
$$\sim \int dk \, \hat{f}(k) \, e^{ikx}$$

(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 ψ mit der Breite σ

- Frage: Wie entwickelt sich ψ ?

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

k in x-Richtung

(a) Normierungskonstante A bestimmen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |\Psi(x,0)|^2 \overset{!}{=} 1$$ 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.

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

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

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

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

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

$$= \ldots$$

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

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

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

- Interpretation:

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

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

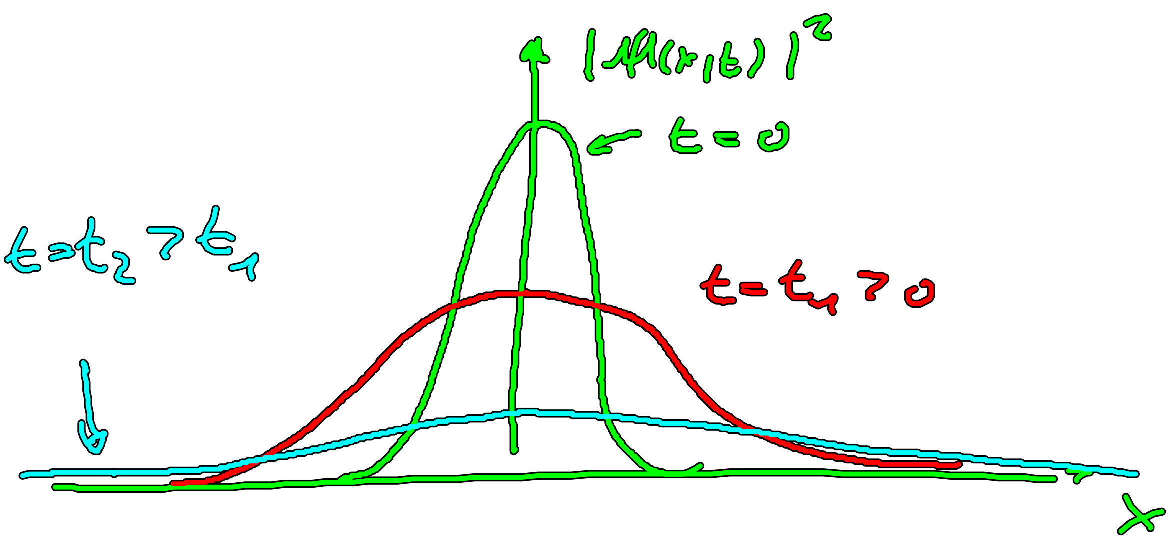
mit $\Delta(t) = \sigma\,|c(t)|$

- 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:

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

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

mgl. Wert von A

$$\langle A \rangle = \sum_n w_n A_n \;\hat{=}\; \int dA\, w(A)\, A$$

Mittelwert einer stat. Größe

W. des Ereignisses A_n

kontinuierl. Variablen

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

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

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)

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

(b) mittlere Schwankungsquadrat

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

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

$$\langle (x - \underset{\substack{\parallel \\ 0}}{\langle x \rangle})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\mathcal{U}(x,t)|^2 x^2$$

$$= \ldots \quad \widehat{=} \text{ ÜB}$$

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

mittlere Schwankungsquadrat der Ortskoordinate für WP-Ausbreitung.

(c) „Ortsunschärfe" des Teilchens ist Δx!

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

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?

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

$\delta = 1 \Rightarrow t_B = \frac{\delta m \sigma^2}{2\hbar}$ 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

$\rightarrow$ 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.

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

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

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

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

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

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

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

$\vdots$

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

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 σ

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$ 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 nicht
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