English Summary:

Particle-Wave Dualism

	Wave experiment e.g., diffraction	Particle exp e.g., scattering (Photo effect, Compton eff.)
Light	classical frequency ω, wave vector $\underline{k}$ $\omega = c\lvert\underline{k}\rvert$ dispersion relation	non-classical energy $E = \hbar\omega$, momentum $\underline{p} = \hbar\underline{k}$ (de Broglie) $E = cp$
Electron	non-classical $\omega = E/\hbar$ $\underline{k} = \underline{p}/\hbar$ $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$	classical E, $\underline{p}$ $E = \frac{p^2}{2m}$ (non relativistic energy-momentum relation)

group velocity $\frac{d\omega}{dk}$ $\hat{=}$ particle velocity

quantum-mechanical state defined by measuring a complete set of observables

1.3 Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung

Notation: $|\psi\rangle$ abstrakter Zustand

$\psi(\underline{r})$ speziell: Wellenfkt. in der Ortsdarstellung

Gesucht: Bewegungsgleichung für die Materiewellenfkt. $\psi(\underline{r}, t)$

Postulate: (i) Dgl. 1. Ordnung in der Zeit, damit $\psi(\underline{r}, t)$ durch die Anfangsverteilung $\psi(\underline{r}, 0)$ festgelegt ist

(qm. Zustand ist vollständig durch $|\psi\rangle$ bestimmt)

(ii) linear in ψ und homogen, damit Superpositionsprinzip gilt (Interferenzeffekte von Materiewellen)

(iii) Ebene Wellen

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

mit der Dispersionsrelation

$$\omega(\underline{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \left(\text{wegen deBroglie: } E = \hbar\omega,\ \underline{p} = \hbar\underline{k},\ E = \frac{p^2}{2m}\right)$$

sollen Lösungen der kräftefreien ($V=0$) Schrödingergl. sein:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\omega\psi = -i\frac{\hbar k^2}{2m}\psi = \frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

$$\Leftrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi} \quad \text{freie, zeitabhängige Schrödingergl.}$$

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

$$\boxed{\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\psi(\underline{r},t) = \underbrace{\hbar\underline{k}}_{\underline{p}}\,\psi(\underline{r},t)} \qquad (*)$$

$\underline{p}$ Impuls des Elektrons nach deBroglie

Im (kräftefreien!) Zustand ψ erhält man also den Messwert des Impulses $\underline{p}$ durch Anwendung des Impulsoperators $\hat{\underline{p}} := \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$ auf die Wellenfkt. $\psi(\underline{r},t)$.

(*) ist die Eigenwertgl. des Impulsop.:

$$\boxed{\hat{\underline{p}}\psi = \underline{p}\psi}$$

Zustand $\longrightarrow$ Wellenfkt. $\psi(\underline{r},t)$

Observable $\longrightarrow$ Impulsop. $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}$

Messwert $\longrightarrow$ Eigenwert $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ $\quad (\in \mathbb{R}^3 !)$

Mittelwert vieler Messung $\longrightarrow$ Erwartungswert $\langle \hat{\underline{p}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{\underline{p}} \psi \, d^3r$

(Für Impuls-Eigenzustand:

$\int \psi^* \hat{\underline{p}} \psi \, d^3r = \int \psi^* \underline{p} \psi \, d^3r = \underline{p} \underbrace{\int \psi^* \psi \, d^3r}_{1} = \underline{p}$)

<u>Bemerkung</u>:

Klass. Mechanik: Impuls ist <u>Erhaltungsgröße</u>, falls keine äußeren Kräfte wirken

QM: Impuls-<u>Eigenzustand</u> $\psi(\underline{r},t) = e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ ist nur Lösung der (kräfte)freien Schrödingergl.

<u>Operator der Energie</u> (Hamilton-Op. $\hat{H}$):

kinet. Energie $T = \frac{\underline{p}^2}{2m} \longrightarrow \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

Hamiltonfkt. $H(\underline{p},\underline{q}) = T + V(\underline{q}) \longrightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})$

Hamiltonop.

$\underline{q} \longrightarrow \underline{r}$ Ortsop. (multiplikativ)

<u>zeitabhängige Schrödingergl.</u>:

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

äußeres Pot. $V(\underline{r})$

<u>Bemerkungen</u>

(i) <u>Phys. Bedeutung</u> der Wellenfkt.:

$|\psi(\underline{r},t)|^2 d^3r$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Vol.element d^3r am Ort $\underline{r}$ zu finden.

$$\psi(\underline{r},t) = \underbrace{|\psi(\underline{r},t)|}_{\text{Betrag}}\, e^{i\overbrace{\varphi(\underline{r},t)}^{\text{Phase}}} \quad : \text{Wahrscheinlichkeits-amplitude}$$

Relative Phasen sind in Interferenzexp. beobachtbar.

$|\psi|^2$ ist keine Materiedichte, sondern eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

(ii) Normierung (Wahrscheinlichkeitserhaltung)

$$\int_V |\psi(\underline{r},t)|^2 d^3r = 1$$

z.B. ebene Welle

$$\psi(\underline{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)}$$

(iii) Schrödingergl. ist zeitumkehrinvariant

d.h. zu jedem Bewegungsablauf $|\psi(\underline{r},t)|^2$ ist auch der zeitgespiegelte $|\psi(\underline{r},-t)|^2$ ein physikalisch möglicher Vorgang:

$$\left.\begin{array}{l} t \to -t \\ i \to -i \end{array}\right\} \text{ d.h. } \psi(\underline{r},t) \to \psi^*(\underline{r},-t)$$

(Nichtbeobachtbarkeit der Phase ausgenutzt)

Beweis: Sei $\psi(\underline{r},t)$ Lösung von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right)\psi(\underline{r},t)$

komplex konj. Schrödingergl. $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\underline{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right)\psi^*(\underline{r},t)$

$t \to -t$: $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\underline{r},-t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right)\psi^*(\underline{r},-t)$

d.h. $\psi^*(\underline{r},-t)$ ist auch Lösung der Schrödingergl.

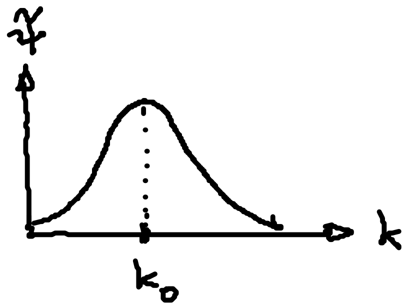
(iv) Wellenpaket

Wellenpaket $\psi(\underline{r},t) = \int \tilde{\psi}(\underline{k})\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)} d^3k$ mit $\omega(\underline{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

sind Lösung der kräftefreien Schrödingergl.

Entwicklung der Phase $kx - \omega(k)t$ um $k = k_0$ (1-dim.)

$$\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \underbrace{(k-k_0)}_{k'} \underbrace{\frac{d}{dk}\omega(k)\Big|_{k_0}}_{v_g} + \dots$$

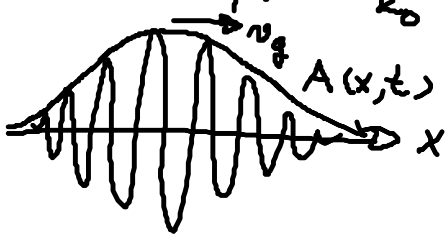


$$\psi(x,t) \approx \int dk' \, \tilde{\psi}(k_0+k') \, e^{i[(k_0+k')x - (\omega_0 + v_g k')t]}$$

$$= \underbrace{e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}}_{\text{Trägerwelle}} \underbrace{\int dk' \, \tilde{\psi}(k_0+k') \, e^{ik'(x - v_g t)}}_{\text{Einhüllende } A(x,t)}$$

Trägerwelle (Phasengeschw. $v_{ph} = \frac{\omega_0}{k_0}$)

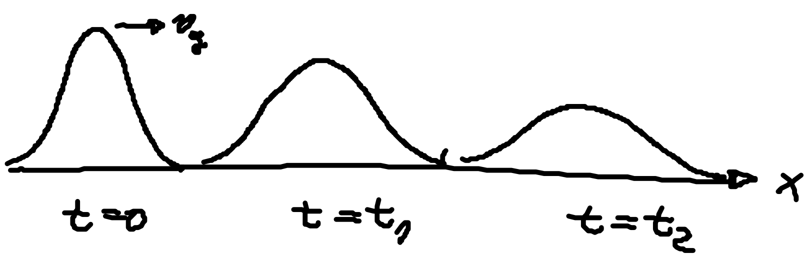
Einhüllende $A(x,t)$ (Schwerpkt. bewegt sich mit Gruppengeschw. $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$) = klass. Teilchengeschw.



<u>$t > 0$</u> : Das Wellenpaket zerfließt, da sich die einzelnen k-Komponenten verschieden schnell ausbreiten

(Grund: nichtlin. Dispersionsbez. $\omega(k)$ bereits im <u>kräftefreien</u> Fall!

$\leftrightarrow$ el. magn. Wellen im Vakuum)



Interpretation im Sinne der Wahrscheinlichkeit, nicht der Materiedichte

(sonst: Widerspruch zur Stabilität der Materie)

Makroskop. Objekte: zerfließen auf irreal langer Zeitskala!

z.B. 1 g Wasser, $\Delta x(0) = 1$ cm $\Longrightarrow$ Verdopplung nach Zeit 10^{19} Jahre

(Alter der Erde 5×10^9 Jahre !!)