

e) Gruppengeschwindigkeit:

• Methode der stationären Phase:

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

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

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

$$\underline{r}_m = \underline{v}_{gr} t + \underline{r}_0 \quad (3.22)$$

mit $\underline{r}_0 = -\hbar \nabla_{\underline{p}} \alpha(\underline{p}) \Big|_{\underline{p}_0}$

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

... Gruppengeschw.

$\hat{=}$ „Geschw. des Teilchens“

f) Gaußsches Wellenpaket (1dim): wichtig!

zur Illustration

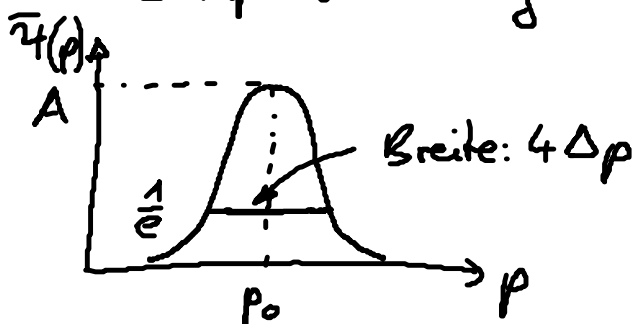
Def:

$$\psi(x, t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \bar{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} \quad (3.24)$$

mit $\bar{\psi}(p) = A e^{-(p-p_0)^2 / [4(\Delta p)^2]}$, $E = \frac{p^2}{2m}$, $A = \frac{1}{\sqrt{4\sqrt{2\pi} \Delta p^2}}$

Gauß-Verteilung!

aus Normierung:
 $\int |\bar{\psi}(p)|^2 dp = 1$



• Diskussion, Beweis: s. Übungen

• Mittelwerte: Impuls

$$\langle p \rangle \stackrel{(3.13)}{=} p_0 \quad \left. \vphantom{\langle p \rangle} \right\} (3.25)$$

$$\text{Unschärfe: } [\langle (\varphi - p_0)^2 \rangle]^{1/2} = \Delta p$$

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

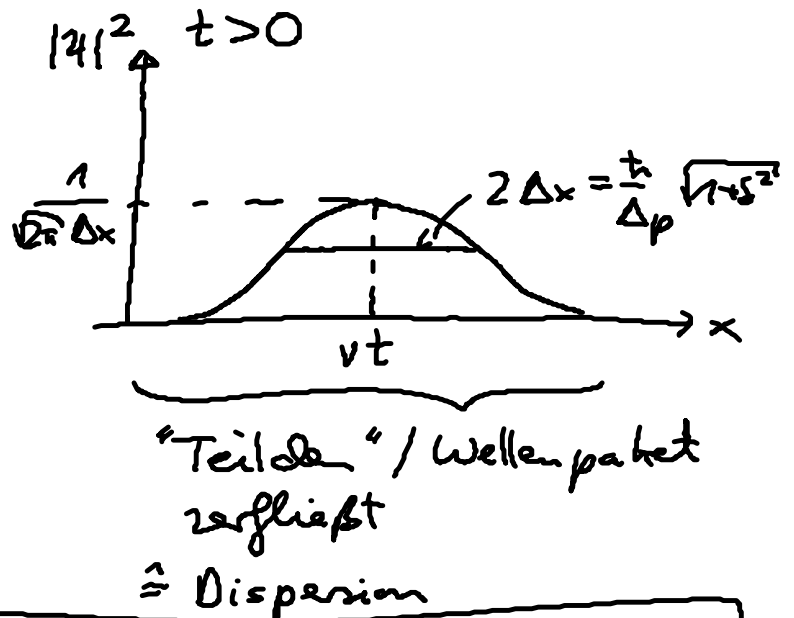
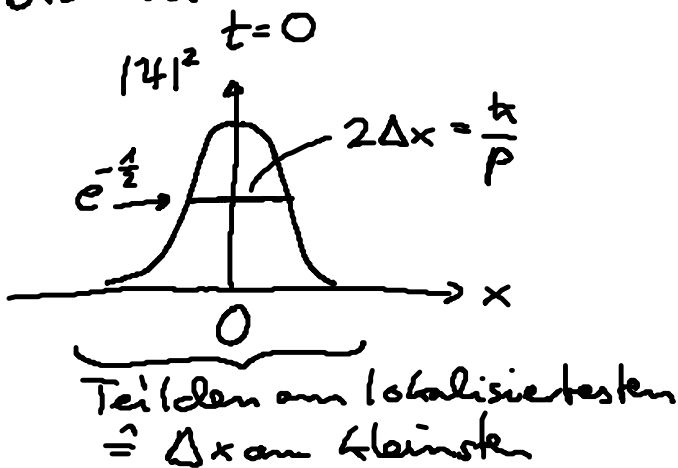
Re ψ , Im ψ s. Applet

$$\Rightarrow |\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2(\Delta x)^2}} \quad \dots \text{Gauß-Verteilung}$$

mit $\langle x \rangle = vt$, $v = \frac{p_0}{m}$ (3.26)

$$\text{Unschärfe: } \Delta x = [\langle (x-vt)^2 \rangle]^{1/2} = \frac{\sqrt{1+S^2}}{2\Delta p/\hbar} \quad \text{mit} \quad S = \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar m}$$

• Diskussion:



• wichtig!

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

(i) Ort und Impuls können nicht gleichzeitig beliebig scharf gewählt werden \rightarrow kein klassisches Teilchen

(ii) $\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$ ist allgemeingültig für Wellenpakete,
 Eigenschaft der FT: $\Delta x \rightarrow 0, \Delta k \rightarrow \infty$
 $\Delta x \rightarrow \infty, \Delta k \rightarrow 0$

QT: Anwendung auf Welle-Teilchen-Dualismus

Bsp: (i) makroskopisches Teilchen:

\approx klassisches Teilchen $\Delta v = 10^{-4} \frac{\text{m}}{\text{s}} \rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta v} = 10^{-24} \text{ m}$
 $= 10^{-14} \text{ Atomradien}$
 $m = 10^{-6} \text{ kg}$
 1mm Sandkorn

(ii) mikroskop. Teilchen:

e^- im Atom: $\Delta x = a_1 = 0.5 \text{ \AA} \dots$ Bohrscher Radius

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

e^- kein klass. Teilchen,
 verschmiert über Atom

[vgl. Bindungsenergie im H-Atom: $|E_n| = R_y = 13 \text{ eV}$]

3.3. Die Schrödinger-Gleichung (SG)

• Ziel: SG für Wellenfkt. eines Teilchens im Pot. $U(x)$?
 formale Regel zum Aufstellen?

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

• Erinnerung: EES für freies Teilchen:

$E = \frac{p^2}{2m} =: H_0 \dots$ "Hamiltonfkt." des freien Teilchens
 (3.28)

• Führe Operatoren ein: wirken auf Fktn. $f(x,t)$ [s. Kap. 4.1b]

$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ "Energieoperator"	(3.29)
$p \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$... Impulsoperator	

← sinnvoll Kap. 4.2/5.2

... Korrespondenzregel

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

... freie Hamiltonoperator

• damit:

EES der Klass. Mech. $E = H_0$ Operatoren angewendet auf ψ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) = \hat{H}_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}, t) \quad (3.30)$$

... freie SG

b) allgemeine SG

• Mitnahme von Potential $U(\underline{r})$?

• „Herleitung/Motivation:“
Messiah, anschaulich
Dolling, über Hamilton-Jacobi

formale Analogie zwischen

(i) Hamiltonsche 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

$$t = \frac{1}{c} \int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} \underline{k} \cdot d\underline{r} = \frac{1}{c} \int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} n(\underline{r}) \hat{k} \cdot d\underline{r}$$

$k = \frac{2\pi n}{\lambda}$
 $c = \lambda \nu$
Brechungsindex

Wellenl. für Licht \leftrightarrow Wellenl. für Materie

• direkt: Korrespondenzregel

EES: $E = H$ Operatoren angewendet auf ψ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (3.31)$$

... allg. SG

• Hamiltonfkt: $H = \frac{p^2}{2m} + U(\underline{r})$
potentielle Energie

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

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

→ allgemeine SG:

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

• SG ist Dgl. 1. Ord. in t :

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

→ SG beschreibt zeitliche Entwicklung 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

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

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

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

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

(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:

$$\left. \begin{aligned} \psi^* \left| i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi \right|^* \\ \psi \left| -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi^* \right. \end{aligned} \right\} \ominus$$

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \\ \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x_i} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x_i} \psi^* \right) \\ &= \nabla \cdot \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{r}, t) + \operatorname{div} \underline{j}(\underline{r}, t) = 0$$

$$\rho(\underline{r}, t) = \psi^* \psi = |\psi(\underline{r}, t)|^2 \dots \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \quad (3.36)$$

$$\underline{j}(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right] \dots \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte}$$

... Kontinuitätsgleichung
für Wahrscheinlichkeitsdichte
 $\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße