

Wk:

Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion $\psi(\underline{r}, t)$ im Fall, dass Kräfte anwesend sein können!

Anforderungen

i) Kräftefreien Fall: Lösungen sollen ebene Wellen oder Linienkombinationen ~~of~~ daraus sein!

ii) Die Gleichung muss linear in $\psi(\underline{r}, t)$ sein
→ damit das Superpositionsprinzip gilt
(wichtig für die Begründung Wellenpakete)
" für die Erklärung von Interferenzerscheinungen

iii) Die Gleichung soll eine (partielle) Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit sein

Dann ist $\psi(\underline{r}, t)$ vollständig festgelegt durch Anfangswert $\psi(\underline{r}, t=0)$

(vgl. Mass. Mechanik z.B. Lagrange - Q. 2. Art sind
Differentialgleichungen 2. Ordnung
in der Zeit!

→ man muss sowohl den Ort als
auch die Geschwindigkeit eines
Teilchens bei $t=0$ vorgeben!

Betrachte zunächst freies Teilchen (\underline{k}, ω)
und „probieren“ $\psi(\underline{r}, t) = A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\ &= -i\omega A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} = -i\omega \psi(\underline{r}, t) \\ &= -i\hbar \frac{\hbar \omega}{2m} \psi(\underline{r}, t) \end{aligned}$$

Dispersionsrelation

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{freies Teilchen!})$$

andernfalls gilt: $\nabla^2 \psi = -k^2 \psi$
 $\Delta_{\text{Laplace}} \psi(\underline{r}, t) = \nabla \cdot \nabla \psi = \nabla \cdot \nabla A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$

$$\begin{aligned}
 \Delta \psi(\underline{r}, t) &= \nabla \cdot (i \underline{k} A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}) \\
 &= i^2 \underline{k}^2 A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\
 &= -\underline{k}^2 A e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\
 &= -\underline{k}^2 \psi(\underline{r}, t)
 \end{aligned}$$

Vergleiche das mit der (1.) Zeitableitung

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

Zeitabhängige Schrödingergleichung (SG) für ein
freies Teilchen (in der sogenannten „Ortsdarstellung“)

Bemerkung:

Dieselbe SG gilt auch für
 ein Wellenpaket (Linearkombination
 ebener Wellen)

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

mit $\omega = \hbar \underline{k}^2$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} &= \int d\underline{k} \left(\frac{-i^2 \hbar^2}{2m} \omega f(\underline{k}) e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \right) \\
 &= \int d\underline{k} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} f(\underline{k}) e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\underline{k} \Delta e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} f(\underline{k}) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t)
 \end{aligned}$$

Umformulierung der Schrödinger SG

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

definiere $\hat{p} := \frac{\hbar}{i} \nabla$ Gradient

„Impulsoperator“
in der Ortsdarstellung

(Notation \hat{A} ist ein Operator!)

$$\hat{p} \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t)$$

Vektor-
Operat

$$\hat{p}^2 \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\underline{r}, t) \right) \\ = -\hbar^2 \Delta \psi(\underline{r}, t) \quad !$$

Folgerung: $\frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t)$

Einsd an in die Schrödinger-Gleichung $\int G$:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\underline{r}, t)}$$

Der Ausdruck $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ erinnert

schon an die klass. Mechanik.

$$\text{Dort } E = \frac{p^2}{2m} = T = H_{\text{kin}}$$

Energie des
freien Teilchens

Kinetische
Energie

kinetische Anteil der
Hamiltonfunktion

Identifiziere:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_{\text{kin}}$$

„Hamilton-Operater“
eines freien Teilchens

— analog zur Heisenbergschen
Erkenntnis in der Mechanik!

also:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{kin}} \psi(\underline{r}, t)$$

SG für freie Teilchen

Bemerkung: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_{\text{kin}} \psi$

SG für ein freies Teilchen in
darstellungunabhängiger Form!

Verknet:

Ortsdarstellung:

$$\hat{H}_{\text{kin}} \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\underline{r}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}, t)$$

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$

Was passiert in Anwesenheit
von Kräften?

Z.B. H-Atom: e^- (Elektron) ist gebunden an den positiv geladenen Atomkern

→ Coulombpotential $V(r) \sim -\frac{1}{r}$

Abstand zw. e^- und Proton

definiere den „vollen“ Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + V(\hat{r})$$

potentieller Anteil

← analog zur klass. Hamilton-Mechanik.

$$H = T + V$$

\hat{r} : „Orts-Operator“

Wirkung in der Ortsdarstellung $\hat{r} \psi(r, t) = r \psi(r, t)$

(d.h. angewandt auf ortsabhängige Wellenfunktion)

$$V(\hat{r}) \psi(r, t) = V(r) \psi(r, t)$$

Vollständig Schrödingergleichung

$$\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(r, t)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

→ Ortsdarstellung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

Bemerkungen

- i) Diese SG ist, wie Anfangs geladert, 1. Ordnung in der Zeit und linear in φ !
- ii) Erweiterung auf nicht-Konservative Fälle (z.B. elektromagnet. Felder) möglich
— ähnlich wie in der klass. Mechanik Hamiltonfunktion eines Teilchens in elektromagnet. Feld
- iii) SG ist als Postulat zu sehen (ähnlich wie die Newton'sche Axiome)
— hat sich im Vergleich mit Experimenten bewährt

II.3. Kontinuitätsgleichung

Erklärung:

$|\psi(r,t)|^2 \hat{=} \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$
dafür, daß sich ein Teilchen zu Zeit bei r aufhält

(es gilt: $\int d^3r |\psi(r,t)|^2 = 1$)

Wie ändert sich die (Aufenthalts-) Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Zeit?

Vorbemerkung: Analogie zu anderen Größen in der Physik!

Z.B. - Elektrodynamik:

$$\text{Ladungsdichte} = \frac{\text{Ladung}}{\text{Volumenelement}}$$

- Strömungsphysik:

$$\text{Massendichte} \hat{=} \frac{\text{Masse}}{\text{Volumenelement}}$$

das hat man.

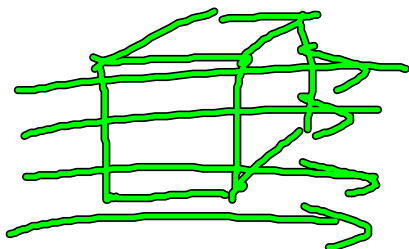
$$\frac{\partial \rho(r,t)}{\partial t} = - \nabla \cdot \mathbf{j}(r,t)$$

↑
Dichte

↑
Divergenz
↓
Stromdichte

Interpretation:

Ändert sich die Dichte (z.B. der Ladung, Masse) in einem Volumenelement, so impliziert das einen Fluss durch die Oberfläche dieses Volumens!



Man nennt die Gleichung „Kontinuitätsgleichung“
($\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{r}, t) = -\nabla_j j(\underline{r}, t)$)

— reflektiert die „Erhaltung“ einer
Größe (z.B. Ladungserhaltung, Massenerhaltung)

NB:
 $\langle \underline{r} \rangle \int d\underline{r} |\psi(\underline{r}, t)|^2 \underline{r} \stackrel{!}{=} \text{ bzw. } \int d\underline{r} |\psi(\underline{r}, t)|^2 = 1$

Suche nun nach der Kontinuitätsgleichung
für die Dichte des Aufenthaltswahrsch.

— was ist also der
„Strom“ hier?

berechne dazu:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\underline{r}, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

benutze die SG: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

$$\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^* \quad !$$

Dabei haben wir benutzt, dass \hat{H} reell ist

gehe in die Ortsdarstellung:

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

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^*$$

Einsetzen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\underline{r}, t)|^2 &= \left(-\frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi + \frac{V}{i\hbar} \psi \right) \cdot \psi^* \\ &\quad + \psi \left(\frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi^* \right) \end{aligned}$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$$

$$+ \frac{V}{i\hbar} \psi \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi \psi^*$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$$

Erinnerung an die klass. Form der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{r}, t) = -\nabla \cdot \underline{j}(\underline{r}, t)$$

$$\downarrow$$
$$|\psi(\underline{r}, t)|^2$$

Schreibe die rechte Seite unserer Gleichung so um, dass Divergenz da steht

benutze:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) &= \cancel{\nabla \psi^* \nabla \psi} + \psi^* \Delta \psi \\ &\quad - \cancel{\nabla \psi \nabla \psi^*} - \psi \Delta \psi^* \\ &= \psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\underline{r}, t)|^2 = -\nabla \cdot \underline{j}(\underline{r}, t)$$

$$\text{mit } \underline{j}(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

\underline{j} ist hier der Strom in der
Quantenmechanik