

1. Wellenmechanik

1.1. Klassische Physik

1.1.1. (Hamiltonsche) Mechanik

- Der Zustand eines Punktteilchens wird durch die Angabe von Ort \vec{x} und Impuls \vec{p} , das heißt durch einen Punkt im Phasenraum beschrieben
- Seine Dynamik ist durch die Hamiltonfunktion $H(\vec{x}, \vec{p})$ und die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

festgelegt.

Zum Beispiel für ein Teilchen der Masse m in einem zeitabhängigen Potential $V(\vec{x})$ ist die Hamiltonfunktion die Gesamtenergie

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

und die Bewegungsgleichungen

$$\dot{x}_i = \frac{p_i}{m} = v_i \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i$$

- Lösen der Bewegungsgleichungen unter Anfangsbedingungen (\vec{x}_0, \vec{p}_0) zum Zeitpunkt t_0 ergibt die Trajektorie $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ des Teilchens. Die Trajektorie legt die Zustände des Teilchens zu beliebigen anderen Zeitpunkten fest.
- Die Messung einer physikalischen Messgröße $M(\vec{x}, \vec{p})$ zum Zeitpunkt t liefert wie erwartet das Ergebnis $M(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$. Zum Beispiel Energie $H(\vec{x}, \vec{p})$, Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

Alle diese Punkte müssen in der Quantenmechanik revidiert werden.

1.1.2. Klassische Elektrodynamik

- Elektromagnetische Felder werden durch Angabe des elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$ und magnetischen Feldes $\vec{\mathcal{B}}(\vec{x})$ beschrieben.
- Deren Dynamik ist durch die Maxwellgleichungen festgelegt. In Abwesenheit von Ladung und

Strömen, erfüllen die Felder die Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathcal{E}(\vec{x}, t) = 0$$

mit der fundamentalen Lösung

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

wobei \mathcal{E} eine beliebige Komponente von $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x})$ darstellt und A die Amplitude der Welle bezeichnet.

Die physikalische Lösung ist $\Re(\mathcal{E}(\vec{x}, t)) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\vec{x}, t) + \mathcal{E}(\vec{x}, t)^*)$.

- Die Dispersionsrelation das heißt der Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$ und Wellenvektor \vec{k} beziehungsweise Wellenzahl $k = |\vec{k}|$, lautet für elektromagnetische Wellen (im Vakuum)

$$\vec{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad \text{beziehungsweise} \quad k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$$

- Die Wellengleichung ist linear, also gilt das Superpositionsprinzip: Jede Linearkombination von Lösungen ist wieder eine Lösung. Die Allgemeine Lösung ist eine Superposition

$$\mathcal{E}(\vec{x}, t) = \int d^3k A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

wobei $A(\vec{k})$ die Amplitude für Komponente mit Wellenvektor \vec{k} ist.

- Die Energie im elektromagnetischen Feld ist

$$\begin{aligned} E &= \int d^3x \frac{\epsilon_0}{2} (\mathcal{E}^2(\vec{x}, t) + c^2 \mathcal{B}^2(\vec{x}, t)) \\ &= \int d^3x \epsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

(wegen $|\mathcal{E}| = c|\mathcal{B}|$) und der Energiefluss (Poynting-Vektor)

$$\vec{S} = \mu_0 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$$

beziehungsweise für skalare Felder

$$|\vec{S}| = c\epsilon_0 \mathcal{E}^2(\vec{x}, t)$$

Gemessen wird (in der Regel) die Intensität. Das ist der zeitlich über eine Periode $T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{\nu}$

gemittelter Energiefluss

$$I(\vec{x}, t) = c\epsilon_0 \frac{1}{T} \int_t^{t+T} dt' \mathcal{E}^2(\vec{x}, t)$$

$$= c\epsilon_0 |\mathcal{E}(\vec{x}, t)|^2$$

- Der Nachweis der Wellennatur des elektromagnetischen Feldes im Youngschen Doppelspaltexperiment (Abb. Inspiriert aus Schwabl, Quantenmechanik)

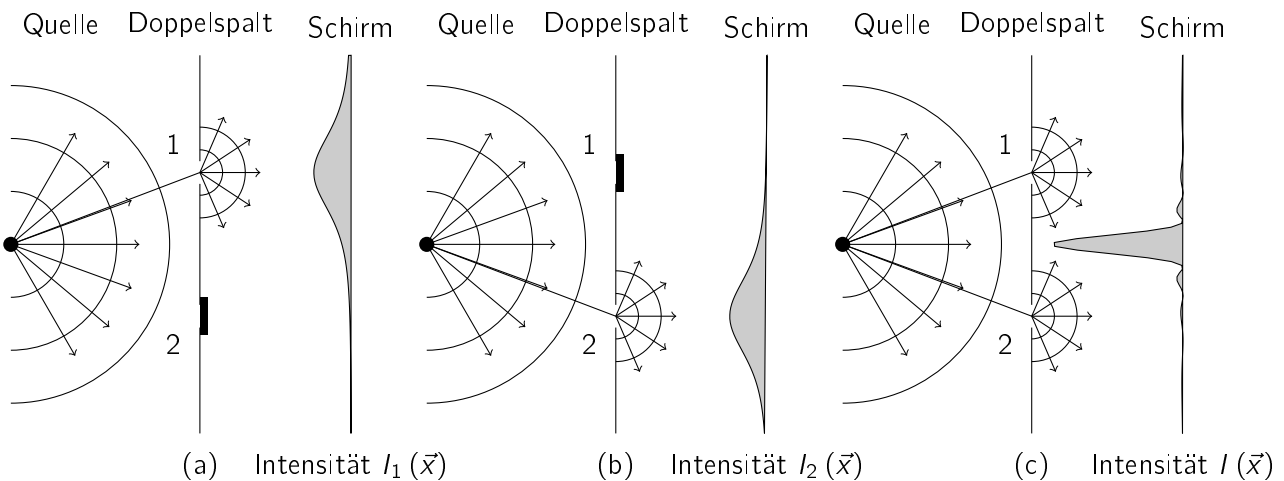


Abbildung 1: Beugung am Doppelspalt (a) mit Spalt 1 geöffnet, (b) mit Spalt 2 geöffnet, (c) beide Spalte geöffnet

$$I \sim |E|^2$$

$$\sim |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\Re(E_1 E_2^*)$$

1.1.3. Zusammenfassung

Mechanik	Elektrodynamik
Teilchen	Wellen
Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$	Felder $\vec{\mathcal{E}}(\vec{x}, t), \vec{\mathcal{B}}(\vec{x}, t)$
Hamiltonsche (Newtonsche) Bewegungsgleichungen	Maxwellgleichungen

Die Trajektorien $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ der Teilchen gehen als Ladungs- und Stromdichten in die inhomogenen Maxwellgleichungen ein; Die Lösungen $\vec{B}(\vec{x}, t)$, $\vec{E}(\vec{x}, t)$ der Maxwellgleichungen gehen über die Lorentzkraft in die Bewegungsgleichungen der Teilchen ein.

1.2. Empirische Grundlagen der Quantenmechanik

1.2.1. Wellen haben Teilchencharakter

- Erste Quantenhypothese durch Max Planck (1900) zur Erklärung des Spektrums der Schwarzkörperstrahlung: die Energie einer Welle der (Kreis-)Frequenz $\omega = 2\pi\nu$ ist ein ganzzahliges Vielfaches eines elementaren Energiequantums

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Das Plancksche Wirkungsquantum h hat die Einheit einer Wirkung = Energie \times Zeit, $[h] = \mathbf{Js}$. Aus Plancks Quantenhypothese ergibt sich das Plancksche Strahlungsgesetz. Es beschreibt das empirisch bekannte Spektrum thermischer Strahlung, wenn

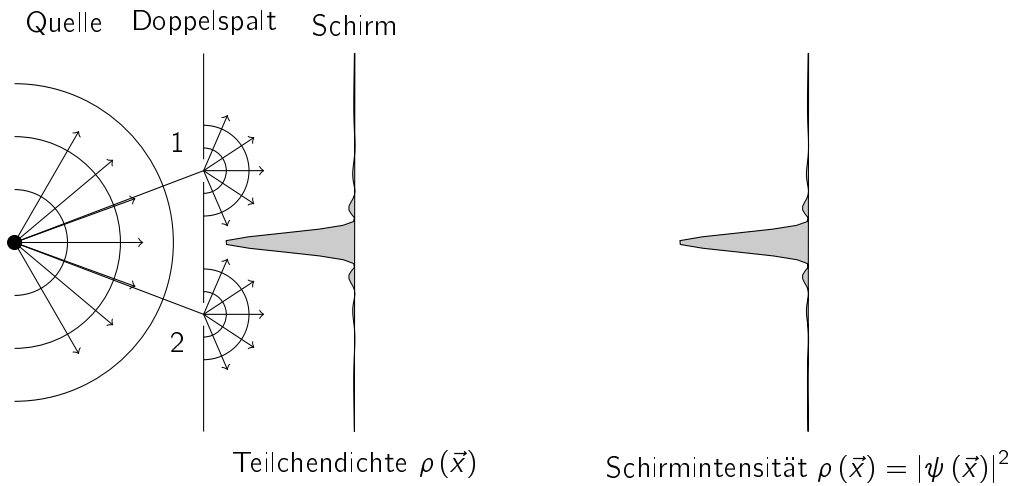
$$h = 6.62 \cdot 10^{-34} \mathbf{Js} \quad \hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \mathbf{Js}$$

gewählt wird.

- Albert Einsteins Erklärung für den photoelektrischen Effekt (1905): Licht der Frequenz ω besteht aus Teilchen der Energie $E = \hbar\omega$ und die Lichtteilchen (Photonen) haben einen Impuls

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (\vec{k} \text{ Wellenvektor})$$

- Comptoneffekt (1924, Vergrößerung der Wellenlänge des Lichts bei Streuung an Elektronen) kann mit $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ als elastischer Stoß zweier Teilchen erklärt werden.
- Doppelspaltexperiment mit Einzelphotonauflösung (Abb. nach Schwabl, Quantenmechanik)



1.2.2. Teilchen haben Wellencharakter

- Bohrsches Atommodell (1913)
 1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen. Sie strahlen dabei keine elektromagnetische Energie ab.
 2. Erlaubt sind nur Kreisbahnen mit Drehimpuls

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3$$

3. Elektromagnetische Energie wird nur bei einem Übergang zwischen zwei Kreisbahnen abgestrahlt.

Konsequenzen aus den Bohrschen Postulaten:

- Mit dem Virialsatz

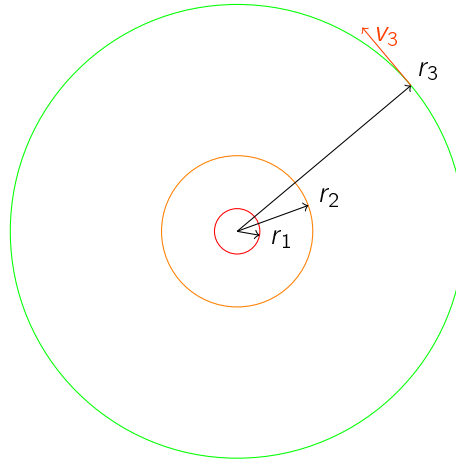
$$E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}E_{\text{pot}} \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

folgt aus der Forderung $L = mrv = n\hbar$ die Geschwindigkeit und der Radius für die n -te Kreisbahn

$$v_n = \alpha c \frac{1}{n} \quad r_n = a_0 n^2$$

mit der Feinstrukturkonstanten α und dem Bohrradius a_0

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha mc} \simeq 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



- Die Energie der n -ten Kreisbahn ist

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m \alpha^2 c^2}{n^2}$$

Bei einem Übergang von der n -ten zur m -ten Kreisbahn wird Strahlung emittiert mit einer Frequenz

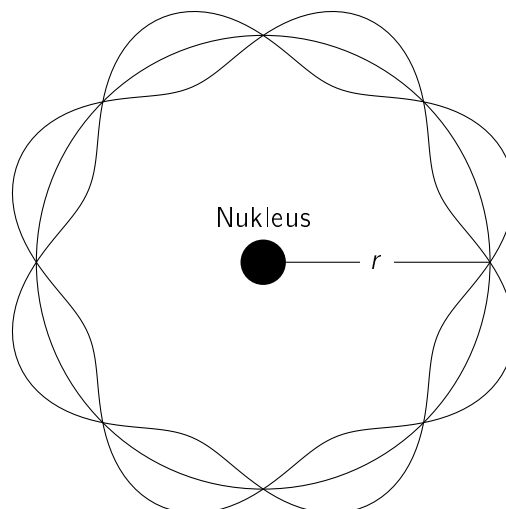
$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Wobei $R = \frac{m \alpha^2 c^2}{2h}$ die Rydbergkonstante ist.

- Luis de Broglie(1924): Die Bewegung eines massiven Teilchens mit Impuls p entspricht einer „Materiewelle“ mit einer de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Damit entsprechen die Bohrschen Kreisbahnen stehenden Wellen der Materiewelle



$$\lambda_n = \frac{h}{mv_n} = 2\pi a_0 n \quad \rightarrow \quad n\lambda_n = 2\pi a_0 n^2 = 2\pi r_n$$

- Direkter Nachweis der Wellennatur geschieht in Interferenzexperimenten:
 Davisson und Germer (1927): Elektron an Kristallgittern
 Jönsson (1954): Doppelspaltexperiment mit Elektronen
 Interferometrie mit organischen Molekülen

1.3. Die Wellenfunktion

[Es folgt eine provisorische und vereinfachte Darstellung der Postulate der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Die exakte und vollständige Darstellung folgt später in Kapitel 2.]

- Die Erfahrung zeigt:
 - Der Zustand eines Teilchens wird durch eine (komplexe) Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}, t)$$

beschrieben.

- Seine Dynamik (zeitliche Entwicklung, Evolution) ist durch die Schrödingergleichung festgelegt

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

Die Lösung der Schrödingergleichung unter einer Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ ergibt die zeitlich entwickelte Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$.

- Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ legt die Statistik der Resultate von Messungen physikalischer Messgrößen $A(\vec{x}, \vec{p})$ zum Zeitpunkt t fest:

Für die Messung der Position des Teilchens gilt (Bornsche Regel): Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Volumen d^3x vorzufinden, ist

$$P(\vec{x}, \vec{p}) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

Das heißt, die Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad ([\rho(\vec{x}, t)] = \mathbf{m}^{-3})$$

- Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum vorzufinden, muss 1 sein:

$$1 = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

Wir fordern daher, dass eine als Wellenfunktion in Frage kommende Funktion $\psi(\vec{x}, t)$

- quadratintegrabel und
- auf 1 normiert ist.

Eine Wellenfunktion (für den Bewegungszustand eines Teilchens) ist damit Element des Hilbert-raumes $L^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegrablen Funktionen,

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}$$

- Die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen ($V(\vec{x}, t) \equiv 0$)

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

wird durch ebene Wellen gelöst

$$\psi(\vec{x}, t) = c e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

mit $c \in \mathbb{C}$ und der Dispersionsrelation

$$\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$$

Mit $E = \hbar \omega$ und $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ (beziehungsweise $p = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$) ist das äquivalent zu $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Eine ebene Materiewelle mit Wellenvektor \vec{k} beschreibt die Bewegung eines freien Teilchens mit Energie

$$E = \frac{(\hbar \vec{k})^2}{2m}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer ebenen Welle ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = |c|^2 \equiv \text{konstant}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist also gleichmäßig im ganzen Raum. Ebene Wellen sind nicht normierbar (nicht Element von $L^2(\mathbb{R}^3)$)! Sie sind keine physikalischen Zustände.

Durch Superposition von ebenen Wellen können normierbare, physikalische Zustände aufgebaut

werden, sogenannte Wellenpakete:

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t]}$$

löst die Schrödingergleichung, wenn $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$ für beliebige Amplituden $c(\vec{k})$.

Normierung erfordert

$$1 = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3k |c(\vec{k})|^2$$

Das heißt, es muss $c(\vec{k})$ selbst quadratintegabel und normiert sein.

- Die Lösung der Schrödingergleichung für eine vorgegebene Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ erhält man aus der Bedingung

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

Also ist $\psi(\vec{x}, 0)$ die Fouriertransformierte von $c(\vec{k})$. Die inverse Transformation ergibt

$$c(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x \psi(\vec{x}, 0) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

Einsetzen der aus der Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, 0)$ bestimmten Amplituden in die Allgemeine Lösung ergibt die Wellenfunktion zu Zeiten t

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k c(\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t]}$$

1.4. Die Impulswellenfunktion

- Die Koeffizienten $c(\vec{k})$ sind die Amplituden der ebenen Wellen $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ (mit festem Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$) im Wellenpaket $\psi(\vec{x})$.

Wir erwarten, dass $|c(\vec{k})|^2$ die Wahrscheinlichkeit festlegt, bei einer Messung des Impulses \vec{p} an einem Teilchen im Zustand $\psi(\vec{x})$ den Wert $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ zu finden.

- Allgemein definieren wir die Impulswellenfunktion $\varphi(\vec{p}, t)$ bei gegebener (Raum)-Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}}$$

(Damit gilt $\varphi(\vec{p}, 0) = \hbar^{-\frac{3}{2}} c\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)$.)

Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Impulses einen Wert \vec{p} zu finden ist

$$P(\vec{p}, t) = |\varphi(\vec{p})|^2 d^3p$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum ist

$$|\varphi(\vec{p})|^2$$

Es gilt

$$\int d^3p |\varphi(\vec{p})|^2 = 1$$

1.5. Wellenmechanik in einer Dimension

- Wir betrachten im Folgenden die Bewegung eines Teilchens in einer Dimension. Sein Zustand wird beschrieben durch eine Wellenfunktion $\varphi(x, t)$ in

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \left| \int dx |\varphi(x)|^2 < \infty \right. \right\}$$

- Ein Teilchen mit Energie $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ wird beschrieben durch eine ebene Welle

$$\varphi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

- Ein Wellenpaket in einer Dimension ist

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ und $\int_{-\infty}^{\infty} dk |c(k)|^2 = 1$. Die zugehörige Impulswellenfunktion ist

$$\psi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x, t) e^{-i\frac{px}{\hbar}}$$

Insbesondere für $t = 0$ ist $\psi(p, 0) = \frac{1}{\hbar} c\left(\frac{p}{\hbar}\right)$

- Beispiel: Gaußsches Wellenpaket

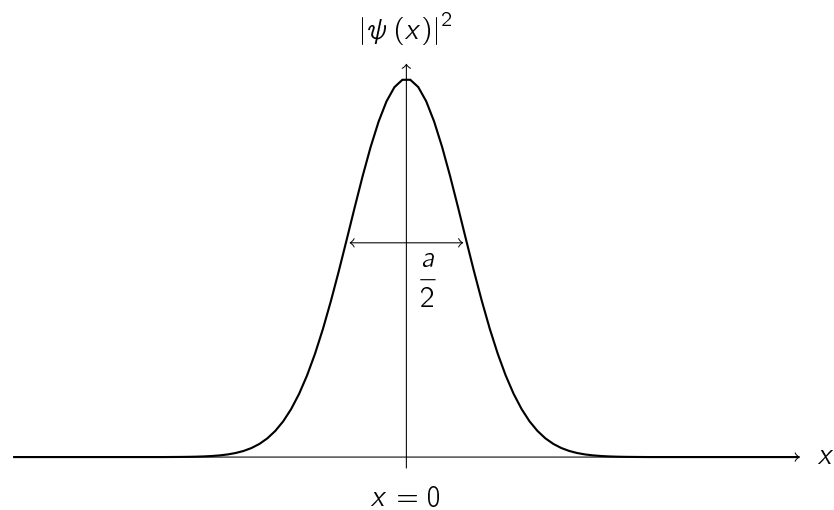
$$\varphi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0 x - \frac{x^2}{a^2}}$$

mit $k_0, a \in \mathbb{R}$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ort ist

$$\rho(x, 0) = |\varphi(x, 0)|^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-2\frac{x^2}{a^2}}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \int dx \rho(x) &= 1 \\ \langle x \rangle &= \int dx x \rho(x) = 0 \\ \langle x^2 \rangle &= \int dx x^2 \rho(x) = \frac{a^2}{4} \\ \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2} \end{aligned}$$



- Die Amplituden $c(k)$ sind

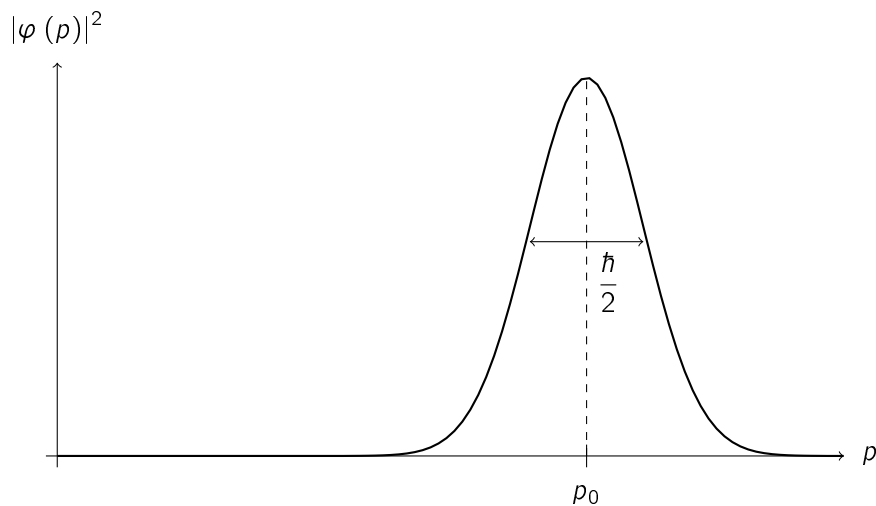
$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x, 0) e^{-ikx} \\ &= \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-(k-k_0)^2 \frac{a^2}{4}} \end{aligned}$$

- Die Impulswellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ ist

$$\psi(p, 0) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-(p-p_0)^2 \frac{a^2}{4\hbar^2}}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \int dp |\psi(p, 0)|^2 &= 1 \\ \langle p \rangle &= \int dp p |\psi(p, 0)|^2 = p_0 = \hbar k_0 \\ \langle p^2 \rangle &= \int dp p^2 |\psi(p, 0)|^2 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2} \\ \Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{a} \end{aligned}$$



Das heißt, dass die Unschärfen in Ort und Impuls nicht unabhängig sind

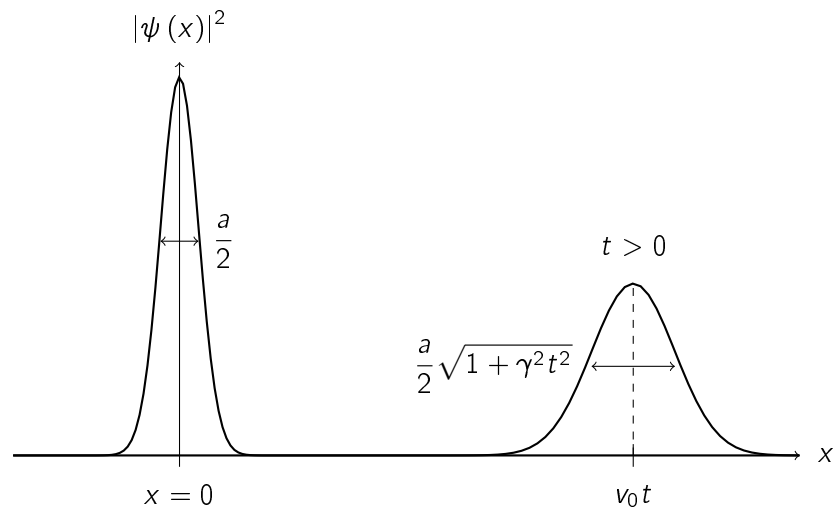
$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

- Das zeitlich entwickelte Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \frac{11}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{e^{i(k_0 x - \phi)}}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/4}} e^{-\frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\gamma t)}}$$

wobei

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} \quad \gamma = \frac{2\hbar}{ma^2} \quad \varphi = \theta + \frac{k_0 v_0 t}{2} \quad \tan(2\theta) = \gamma t$$



Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 \\ &= \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/2}} e^{-\frac{2(x-x_0)^2}{a^2(1+\gamma^2 t^2)}} \end{aligned}$$

mit dem Mittelwert

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= v_0 t \\ \Delta x_t &= \frac{a}{2} \sqrt{1 + \gamma^2 t^2} \end{aligned}$$

- Es gibt keine Änderungen des Impulses beziehungsweise der Statistik von Impulsmessungen für ein freies Teilchen und

$$|\varphi(p, t)|^2 = |\varphi(p, 0)|^2$$

1.6. Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

- In der Elektrodynamik gilt für die Ladungsdichte $\rho_q(\vec{x}, t)$ und die Stromdichte $\vec{j}_q(\vec{x}, t)$ der Erhaltungssatz (\rightarrow Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0$$

Die Gesamtladung ist erhalten

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3x \rho_q(\vec{x}, t) &= - \int_V d^3x \nabla \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= - \int_{\partial V} d\vec{S} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) \\ &= 0, \text{ für } V \rightarrow \infty \text{ wegen } \lim_{x \rightarrow \infty} \vec{j}_q(\vec{x}, t) = 0\end{aligned}$$

- In der Quantenmechanik gilt ein entsprechender Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit. Wir betrachten die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ &= \psi(\vec{x}, t) \dot{\psi}^*(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \dot{\psi}(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung

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

impliziert

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

Damit ergibt sich

$$\psi^* \dot{\psi} + \psi \dot{\psi}^* = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \Delta \psi + V\psi^* \psi \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi \Delta \psi^* + V\psi \psi^* \right)$$

Also

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2m i} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = 0$$

Wir definieren den Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2m i} (\psi^*(\vec{x}, t) \nabla \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \nabla \psi^*(\vec{x}, t)) \\ &= \frac{1}{m} \Re [\psi^*(\vec{x}, t) (-i\hbar \nabla) \psi(\vec{x}, t)]\end{aligned}$$

so, dass

$$\nabla \cdot \vec{j} = \frac{\hbar}{2m i} (\nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + \psi^* \Delta \psi - \nabla \psi \cdot \nabla \psi^* - \psi \Delta \psi^*)$$

Damit gilt der Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit $\int d^3x \rho(\vec{x}, t) = 1$ ist erhalten (Beweis wie in der Elektrodynamik;
 $\lim_{x \rightarrow \infty} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$ weil $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(\vec{x}, t) = 0$)

- Beispiel: Der Wahrscheinlichkeitsstrom für eine ebene Welle $\psi(\vec{x}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$ ist

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* (i\vec{k}) \psi - \psi (-i\vec{k}) \psi^* \right) \\ &= \frac{2i\hbar\vec{k}}{2mi} \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}\end{aligned}$$

- Beispiel: Superposition zweier ebener Wellen in 1D

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)}$$

der Strom ist

$$\vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} (|A|^2 - |B|^2) \vec{e}_x$$

1.7. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

- Falls das Potential $V(\vec{x})$ nicht explizit von der Zeit abhängt, so ist die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \Psi(\vec{x}, t) \\ &= H(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

$H(\vec{x})$ wird als Hamiltonoperator des Systems bezeichnet.

- Separation der Variablen: Wir suchen Lösungen der Art

$$\Psi(\vec{x}, t) = \chi(t) \psi(\vec{x})$$

Damit folgt:

$$i\hbar \dot{\chi}(t) \psi(\vec{x}) = \chi(t) H(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \quad \rightarrow \quad i \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{H(\vec{x}) \psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} \equiv E$$

mit einer Separationskonstanten E (der Dimension Energie). Also fordern wir

$$i\hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = E \quad (1)$$

$$\frac{H\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} = E \quad (2)$$

- (1) äquivalent zu

$$\dot{\chi}(t) = -i\frac{E}{\hbar}\chi(t) \rightarrow \chi(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\chi(0) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

- (2) ergibt die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H(\vec{x})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung:

- $\psi(\vec{x})$ ist eine Eigenfunktion (Energieeigenzustand oder stationärer Zustand) des Hamiltonoperators H .
- E ist der zur Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ gehörende Eigenwert (Energieeigenwert).

Für eine gegebene Eigenfunktion $\psi(\vec{x})$ mit Eigenwert E ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{i\frac{Et}{\hbar}}$$

- Im Allgemeinen besitzt ein Hamiltonoperator mehrere (unendlich viele) Eigenfunktionen und Eigenwerte

$$H\psi_{n,\alpha}(\vec{x}) = E_n\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

n legt die Eigenwerte E_n fest (n, α) legen die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ fest. α ist ein Entartungsindex, der verschiedene Eigenzustände zum selben Eigenwert unterscheidet. Die Indizes (n, α) können diskret und / oder kontinuierlich verteilt sein. Die Menge der Energieeigenwerte $\{E_n\}$ ist das Spektrum des Hamiltonoperators. Das Spektrum kann entsprechend diskret und / oder kontinuierlich sein. [Wir werden alle diese Fälle in Beispielen kennenlernen.]

- Die zeitunabhängige Lösung für jede Eigenfunktion ist

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\psi_{n,\alpha}(\vec{x})$$

Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung ist eine Superposition der einzelnen Lösungen

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} \psi_{n,\alpha}(\vec{x}, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} e^{-i\frac{E_{n,\alpha}t}{\hbar}} \psi_{n,\alpha}$$

Die $c_{n,\alpha}$ sind die Amplituden für die Eigenzustände $\psi_{n,\alpha}$ und ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$ [siehe später].

- Beispiel: Freies Teilchen: Es gilt also $V(\vec{x}) \equiv 0$ also ist der Hamiltonoperator $H(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ und die zeitunabhängige Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$$

Eigenzustände des Hamiltonoperators sind ebene Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

mit zugehörigem Eigenwert

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

Der Wellenvektor $\vec{k} \in \mathbb{R}$ legt die Eigenzustände und -werte fest.

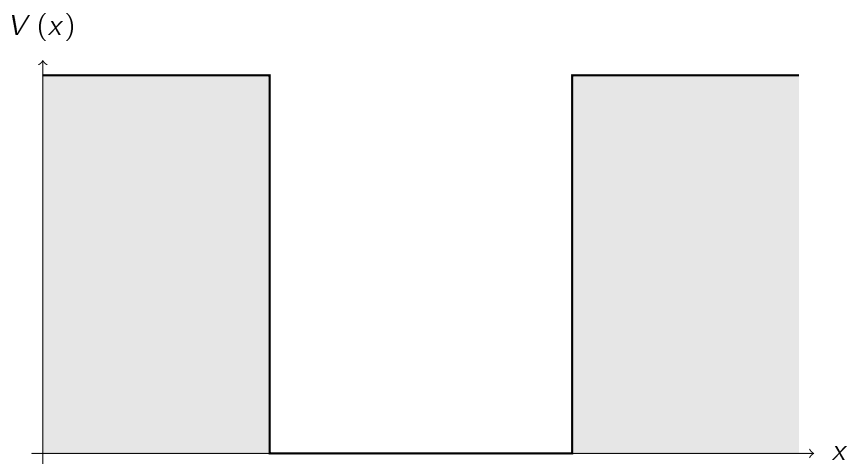
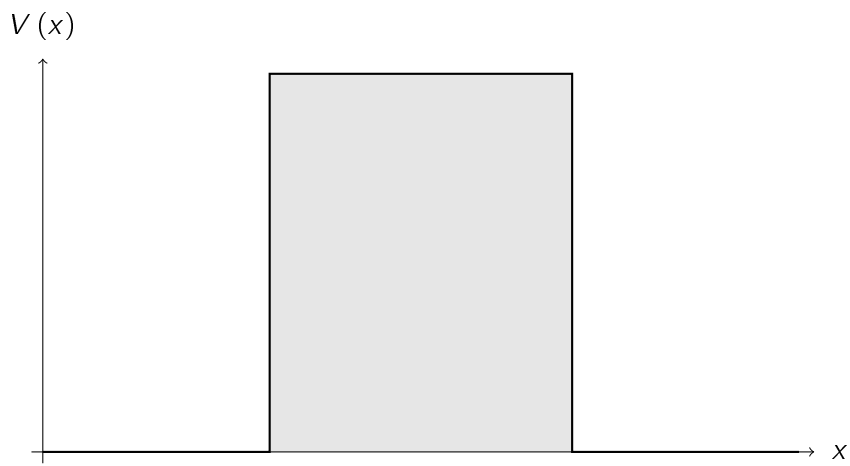
Die allgemeine Lösung lautet

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int d^3k c(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad \text{mit } \omega = \frac{E_{\vec{k}}}{\hbar}$$

Ist also ein Wellenpaket. Die Amplituden $c(\vec{k})$ ergeben sich aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$.

1.8. Wellenmechanik in einer Dimension mit Potential

- Die Schrödingergleichung soll für stückweise konstantes, zeitunabhängiges Potential $V(\vec{x})$ gelöst werden, also zum Beispiel.



Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

