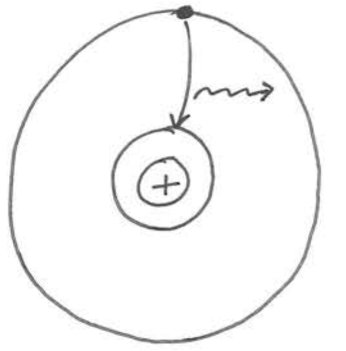
Quantenmechanik

1. Die Schrödingergleichung

Bohr 1916:



Diskrete Energieniveaus

Planck/Einstein: ~1900

Energie $E = \hbar\omega$ für Photonen

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad h \approx 6 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$$

"Planck'sches Wirkungsquantum"

(Wirkung hat Dimension $[x \cdot p] = \mathrm{Js}$)

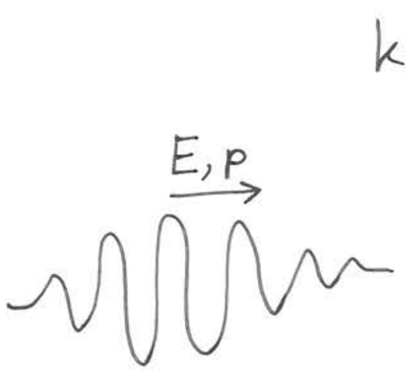
$\omega = 2\pi\nu$ ← Oszillationen/sec

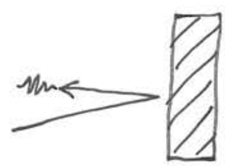
$\Rightarrow$ (Einstein)

Impuls $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ für Photonen

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ Wellenzahl

$k = |\vec{k}|$ ← Wellenvektor





Impulsübertrag $2 \cdot p$ bei Reflexion!

de Broglie (1923):

Teilchen $\longleftrightarrow$ "Materiewellen"

auch dort:
$$E = \hbar\omega$$
$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

aber jetzt: $$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \Leftrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$$

(statt $E = c\cdot|\vec{p}|$ für Photonen)

Schrödinger (1926):

Finde (lineare) Wellengleichung, ~~mit~~ die $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ liefert!
("Dispersionsrelation $\omega = \omega(\vec{k})$")

Wellenfeld $\psi(\vec{r},t)$

Translationsinvarianz in Raum & Zeit
(jedes $(\vec{r},t)$ "gleich gut")

$\Rightarrow$ Lösungen werden <u>ebene Wellen</u> sein!

$$\psi(\vec{r},t) = C\cdot e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$
(Konstante, unwichtig hier)

Erhalte ω durch:
$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega\psi$$

Erhalte $\vec{k}$ durch:
$$\vec{\nabla}\psi = i\vec{k}\psi$$
grad

$$\vec{\nabla}^2\psi = -\vec{k}^2\psi$$
div grad

$(= i(\vec{k}\vec{\nabla})\psi)$

$\Rightarrow$ für ebene Materie-Welle:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\psi \qquad (*)$$

denn

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

$= \checkmark$

Nimm an, das gilt allgemein!

z.B. für Superpositionen:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\, e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}} t)}$$

$\Rightarrow$ $(*)$ auch erfüllt!

Summe ~~d~~ von Lösungen ist wieder eine Lsg. für lineare Wellengl.! ("Superpositionsprinzip")

Kräfte? $\Rightarrow$ potentielle Energie $V(\vec{r},t)$, mit $\vec{F} = -\vec{\nabla} V$

$\Rightarrow$ klassisch: $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r},t)$

$\Rightarrow$ Ansatz:

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

Zeitabhängige Schrödingergleichung

$\Rightarrow$ Grundlage der Qu.-mechanik!
(Erweiterungen auf: viele Teilchen, Teilchen im Magnetfeld, relativistische ~~F~~ Bewegung, Quantenfelder)

"Impulsoperator"

$$\hat{\vec{p}} \equiv -i\hbar\vec{\nabla}$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}\Psi + V\Psi$$

Anwendung auf <u>Funktion</u> : $(\underbrace{\hat{\vec{p}}\Psi}_{\text{1. wende an}})(\vec{r})$ ↳ 2. werte Fkt. an Stelle $\vec{r}$ aus!

"Hamiltonoperator"

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

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi}$$

$\hat{H}$: Analogon zur klassischen Hamiltonfunktion $H(\vec{r},\vec{p})$ = Energiefkt.

genauer notiert:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = (\hat{H}\Psi)(\vec{r},t)$$

Komplexes Wellenfeld!

Bedeutung?

Behauptung: Es gilt eine "Kontinuitätsgleichung"

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

mit $\rho = |\Psi|^2$ und $\vec{j} = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}}{m}}_{\text{"}v\text{"}} \Psi\right]$

ρ: Dichte $\qquad$ $\vec{j}$: Stromdichte

Bew.: Einsetzen!
(...)

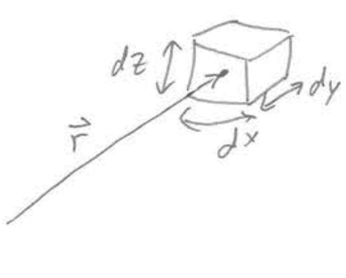
$\Rightarrow \ldots \Rightarrow \int \rho \, d^3\vec{r} \equiv \text{const} \rightsquigarrow$ Dichte ist "erhalten"
"Normierung" ist erhalten, $\int |\Psi|^2 d\vec{r} \equiv \text{const}$

Interpretation (Born):

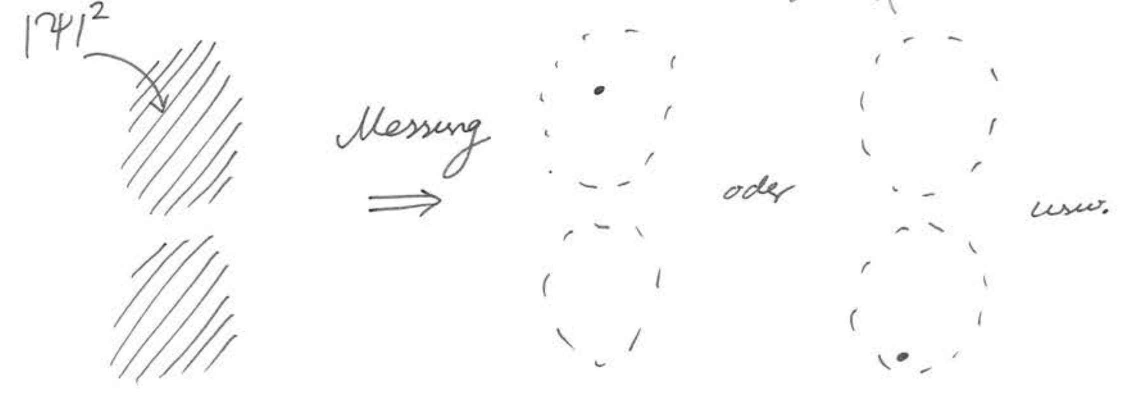
$|\Psi_{(\vec{r},t)}|^2$ ist <u>Wahrscheinlichkeitsdichte</u>,

also

$|\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dx\, dy\, dz$ ist <u>Wahrscheinlichkeit</u>,



Teilchen bei einer Messung in diesem Volumen um $\vec{r}$ herum zu finden!



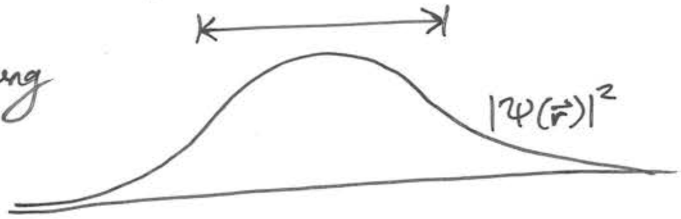
Mittlerer Ort ("Schwerpunkt" der Verteilung):

$$\langle \vec{r} \rangle (t) = \int |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, \vec{r} \, d^3\vec{r}$$

Varianz:

$$\langle (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \rangle = \int |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \, d^3\vec{r}$$

$\Rightarrow$ "Breite" der Ortsverteilung $\sqrt{\langle (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \rangle}$



"Stehende Wellen" = Stationäre Zustände

Sei der Hamiltonoperator zeitunabhängig (also $V(\vec{r}, \cancel{t})$)

$\Rightarrow$ Ansatz:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})\, e^{-i\omega t}$$

$\left[\Rightarrow |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\phi(\vec{r})|^2 \right.$ ist zeitunabh. $\equiv$ stationär $\left. \right]$

in SGl:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \underbrace{\hbar\omega}_{\equiv E}\, \phi(\vec{r})\, \cancel{e^{-i\omega t}} \overset{!}{=} (\hat{H}\phi)(\vec{r})\, \cancel{e^{-i\omega t}}$$

Also: Suche ϕ und $E = \hbar\omega$ ~~...~~, so dass

$$\boxed{E\phi(\vec{r}) = (\hat{H}\phi)(\vec{r})}$$

<u>Stationäre, zeitunabhängige Schrödingerglg.</u>

Es gibt ∞ viele Lösungen (E_n, ϕ_n)

Energie-"Eigenwert" — Energie-"Eigenfunktion"

n = "Quantenzahl" (nummeriert Lösungen)

Später werden wir ganz allgemein zeigen:

1. Alle E_n sind reell, $E_n \in \mathbb{R}$
2. Die ϕ_n ~~bilden eine~~ können als vollständige Orthonormalbasis, ~~und man~~ gewählt werden,

also:

$$\underbrace{\int \phi_n^*(\vec{r})\, \phi_m(\vec{r})\, d^3\vec{r}}_{\text{"Skalarprodukt" zwischen diesen beiden Funktionen}} = \delta_{n,m} \begin{cases} = 1 & n = m \\ = 0 & n \neq m \end{cases}$$

Bem.: Wir werden auch Beispiele mit einem (teilweise) kontinuierlichen Spektrum sehen (wo die E_n beliebig dicht liegen).

Konstruktion beliebiger zeitabhängiger Lösungen:

Superposition von stationären Zuständen

konstante Koeffizienten

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \underbrace{\phi_n(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\text{Lsg.}}$$

ist auch Lsg. der zeitabh. SGl (lineare, homogene Wellengl.!)

(Nachrechnen!)

jetzt: $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ zeitabh.!

Sei $\Psi(\vec{r},t=0)$ gegeben $\Rightarrow$ woher $c_n = ?$

wende $\int \phi_m^*(\vec{r}) \ldots$ an $\Rightarrow$

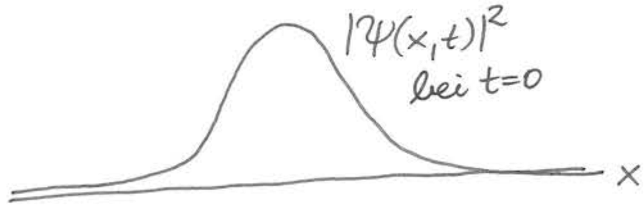
$$\int \phi_m^*(\vec{r})\, \Psi(\vec{r},t)\, d\vec{r} = \sum_n c_n \underbrace{\int \phi_m^*(\vec{r})\, \phi_n(\vec{r})\, d\vec{r}}_{\delta_{m,n}}$$

$$= c_m \checkmark$$

2. Erste Anwendungen

2.1 Freie Bewegung eines Wellenpaketes

Gaußpaket in einer Dimension



$\Rightarrow$?

Einfachster Ansatz:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{x^2}{4\sigma(t)^2} + c(t)}$$

$c(t)$ → wird Normierung richtig stellen!

$\sigma(t)$ → wird zeitabhängige Breite!

↪ Einsetzen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \left[+ \frac{x^2}{2\sigma^3}\dot{\sigma} + \dot{c} \right] \psi$$

$$\overset{!}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \psi$$

$$\partial_x \psi = \left(-\frac{x}{2\cancel{4}\sigma^2}\right)\psi$$

$$\partial_x^2 \psi = \left(-\frac{1}{2\cancel{4}\sigma^2} + \frac{x^2}{4\cancel{4}\sigma^4}\right)\psi$$

$\Rightarrow$ Vgl. der x^2-Terme auf beiden Seiten:

$$i\hbar \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma^3} \overset{!}{=} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{1}{4\sigma^4}$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\sigma} = \frac{i\hbar}{4m}\frac{1}{\sigma}$$

$$\int_{b_0}^{b_t} b\, db \stackrel{!}{=} \frac{i\hbar}{4m} t$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{2}\left(b_t^2 - b_0^2\right) \stackrel{!}{=} \frac{i\hbar}{4m} t$$

$$\Rightarrow \quad b_t^2 = b_0^2 + \frac{i\hbar}{2m} t$$

$$\Rightarrow \quad |\psi(x,t)|^2 = e^{-\frac{x^2}{2} \mathrm{Re} \frac{1}{b^2} + 2 \mathrm{Re}\, c}$$

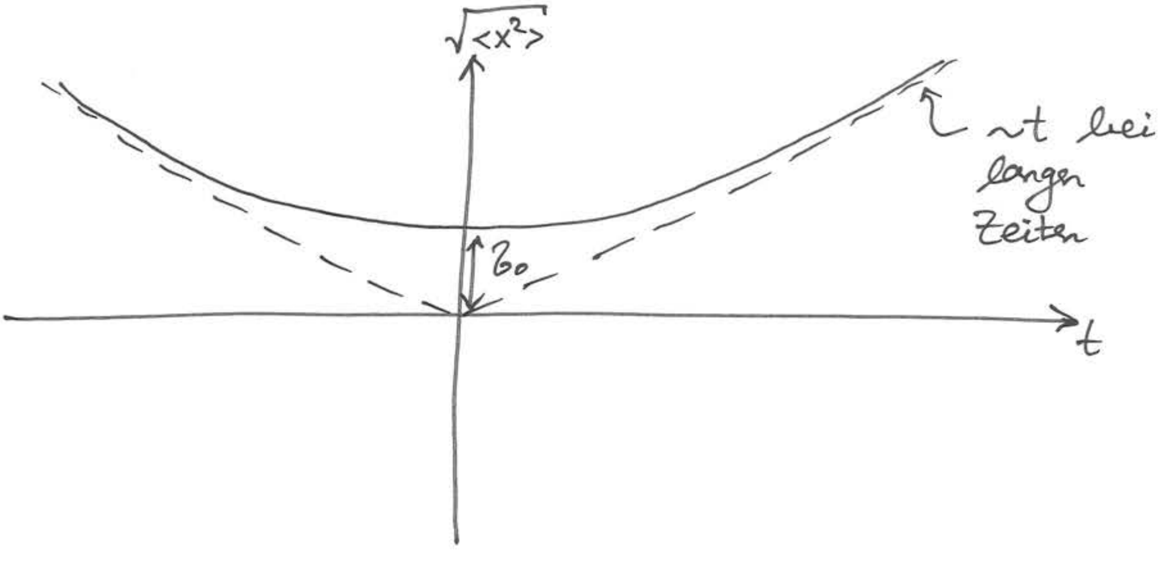
$$\underset{\substack{\text{falls} \\ b_0^2 \in \mathbb{R}}}{=} e^{-\frac{x^2}{2} \frac{b_0^2}{b_0^4 + \left(\frac{\hbar t}{2m}\right)^2} + 2 \mathrm{Re}\, c}$$

$\Rightarrow$ durch Vergleich mit $p(x) \sim e^{-\frac{x^2}{2\langle x^2\rangle}}$

oder direkte Rechnung $\langle x^2\rangle \stackrel{!}{=} \int |\psi|^2 x^2 dx$

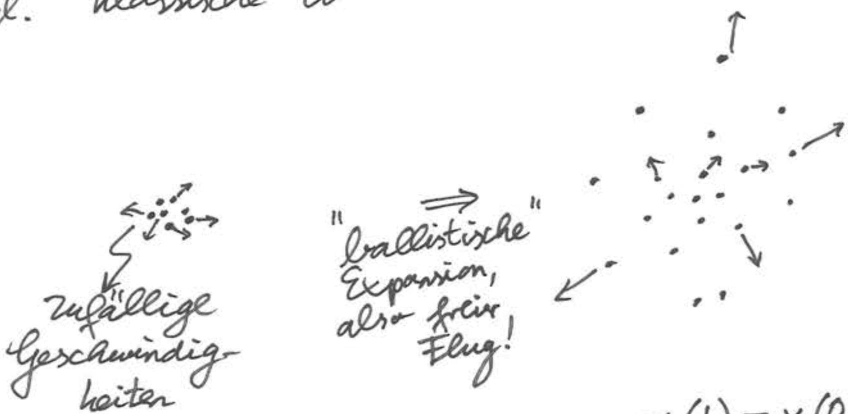
finden wir die Breite:

$$\langle x^2\rangle = b_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m b_0}\right)^2$$



Physikalische Bedeutung?

Vgl. klassische Wolke von Teilchen



$$x(t) = x(0) + v(0)\cdot t$$

$$\Rightarrow \quad \langle x(t)^2\rangle = \langle (x(0) + v(0)\cdot t)^2\rangle$$

$$= \langle x(0)^2\rangle + 2\langle x(0)v(0)\rangle t$$

$$+ \langle v(0)^2\rangle t^2$$

Vgl. mit

$$\langle x^2\rangle = \sigma_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0}\right)^2$$

$$\Rightarrow \quad \langle x(0)^2\rangle = \sigma_0^2 \checkmark$$

und $\langle x(0)v(0)\rangle = 0$

und $\langle v(0)^2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\sigma_0}\right)^2 \sim \frac{1}{\sigma_0^2}$

$\Rightarrow$ Je lokalisierter am Anfang, desto weiter ausgedehnt später!

($\Rightarrow$ später: "Heisenbergsche Unschärfrelation")

Alternative Rechnung (& etwas allgemeiner):

Ebene Wellen $e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}$ sind Lösungen

$\Rightarrow$ Auch

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \; \Phi(k) \, e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}$$

ist Lsg. der SGl !

Wähle jetzt: $\Phi(k) = \mathcal{N} \cdot e^{-\frac{(k-\bar{k})^2}{4\delta k^2}}$

$\mathcal{N}$ ← Normierungskonstante

$\delta k^2 \equiv$ Breite der Verteilung bzgl. k

Trick: quadratische Ergänzung:

$$-\frac{(k-\bar{k})^2}{4\delta k^2} + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m} t$$

$$= -\underbrace{\left[\frac{1}{4\delta k^2} + \frac{i\hbar}{2m} t\right]}_{A} k^2 + \overbrace{\left[\frac{\cancel{4}\bar{k}}{2\delta k^2} + ix\right]}^{B} k - \frac{\bar{k}^2}{4\delta k^2}$$

$$= -A\left(k - \frac{B}{2A}\right)^2 + \frac{B^2}{4A} - \frac{\bar{k}^2}{4\delta k^2}$$

$\Rightarrow$ jetzt: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dk \; e^{-A(\,\ldots\,)^2 + \ldots\ldots}$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{A}} \, e^{\frac{B^2}{4A} - \frac{\bar{k}^2}{4\delta k^2}}$$

↑ nur $(\ldots)^2$ enthält Integr. var. k!

$\Rightarrow$

$$\psi(x,t) = N\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4\delta k^2}+\frac{i\hbar}{2m}t}} \cdot \exp\left[-\frac{\left(x-\frac{i\bar{k}}{2\delta k^2}\right)^2}{\underbrace{\frac{1}{\delta k^2}}_{\to\, 4\sigma_0^2} + \underbrace{\frac{2i\hbar}{m}t}_{\to\, \checkmark \text{ siehe oben}}} - \frac{\bar{k}^2}{4\delta k^2}\right]$$

$$|\psi|^2 \sim \exp\left[-2\,\mathrm{Re}\,\frac{(\;..\;)^2}{..\;+\;..}\right]$$

$$\sim \exp\left[-\frac{1}{\left(\frac{1}{\delta k^2}\right)^2+\frac{4\hbar^2}{m^2}t^2}\; 2\,\mathrm{Re}\;\underbrace{\left(x-\frac{i\bar{k}}{2\delta k^2}\right)^2\cdot\left(\frac{1}{\delta k^2}-2\frac{i\hbar}{m}t\right)}\right]$$

$$\underbrace{\left(x^2+\left(\frac{\bar{k}}{2\delta k^2}\right)^2\right)\frac{1}{\delta k^2} - 2\frac{\hbar\bar{k}x}{m\delta k^2}t}$$

$$=\frac{1}{\delta k^2}\Big(x-\underbrace{\frac{\hbar\bar{k}}{m}t}_{\equiv\,\bar{x}}\Big)^2 + \underset{\substack{\downarrow\\ \text{unabh. von } x}}{\text{const}}$$

$\Rightarrow$ Breite

$$\langle x^2\rangle = \text{wie vorher} = \underbrace{\frac{1}{4\delta k^2}}_{\sigma_0^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2\delta k^2}{m^2}t^2}_{\frac{\hbar^2t^2}{4\sigma_0^2m^2}} \quad \checkmark$$

mittlerer Ort:

$$\langle x\rangle = \bar{x} = \frac{\hbar\bar{k}}{m}t$$

$$\Rightarrow \text{mit } \bar{p}=\hbar\bar{k} \Rightarrow \bar{v}=\frac{\bar{p}}{m} \Rightarrow \bar{x}=\bar{v}t \quad \checkmark$$