Bachelorsymposium 2018: Mittwoch 25.04., 16.00
EW 202

Welle-Teilchen Dualismus
insbes.: – Licht: Teilchencharakter

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar \underline{k}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad \omega = 2\pi\nu$$

relativist. Teilchen, masselos

$$E = cp \qquad (\omega = ck)$$

Dispersionsrelation

Materie, z.B.
– Elektronen: Wellencharakter

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

(für freie Teilchen, nicht-relativistisch)

II. Schrödinger'sche Wellenmechanik

II.1. Materiewellen

Einem Teilchen mit Impuls $\underline{p}$ und Energie E wird eine Welle zugeordnet mit $\omega = \frac{E}{\hbar}$ und $\underline{k} = \frac{1}{\hbar}\underline{p}$

Beschreibung?
Einfachster Ansatz (→ Elektrodynamik)

Materiewelle als ebene Welle (wie Lichtwellen im Vakuum!)

$$\Psi(\underline{r},t) = A\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et)}$$

„Wellenfunktion"

Aber:

Die Wellenfunktion soll meist ein räumlich lokalisiertes Teilchen beschreiben .... obiger Ansatz erstreckt sich über den gesamten Raum!

Nächster Schritt:

Bilde "Wellenpaket" durch Überlagerung (Superposition) ebener Wellen

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

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

„zunächst noch beliebige Gewichtsfunktion"

Bei richtiger Wahl von $f(\underline{k})$ ergibt sich ein lokalisiertes Paket

Warum ist das so wichtig?

Deutung des Wellenpakets durch Max Born

komplex konjugiert

$\Rightarrow$ Die Größe $|\psi(\underline{r},t)|^2 d\underline{r} = \psi(\underline{r},t)\,\psi^*(\underline{r},t)\,d\underline{r}$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement $d\underline{r}$ um $\underline{r}$ zu finden

$\Rightarrow$ $|\psi(\underline{r},t)|^2 d\underline{r}$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Folgerung:

Die Wahrsch., das Teilchen irgendwo im Volumen V zu finden, ist

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

Da diese Wahrsch. endlich sein soll (~~genauer gesagt: sie soll eins sein~~), muß $\psi(\underline{r},t)$ „quadratintegrabel" sein, d.h.

$$\int_V d\underline{r}\, |\psi(\underline{r},t)|^2 < \infty$$

Falls V der gesamte Raum ist, dann fordert man

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

Bemerkung:

Für freie Teilchen schreibt man daher oft:

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

denn dann $\int_V d\underline{r}\, |\psi(\underline{r},t)|^2 = \int_V d\underline{r}\, \frac{1}{V} = V\cdot\frac{1}{V} = 1$

Das bedeutet aber auch (siehe auch später bei Teilchen im Potentialtopf)

dass nicht mehr alle Werte von k_x, k_y, k_z (Komponenten von $\underline{k}$) möglich sind, sondern $k_\alpha = n_\alpha \frac{2\pi}{L}$ $(\alpha = x,y,z)$

n_α ganze Zahlen $\quad L^3 = V \quad$ (Annahme: V Kubus)

Weitere Eigenschaften des Wellenpakets

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

speziell $t=0$: $\psi(\underline{r},t=0) = \int d\underline{k}\; e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \underbrace{f(\underline{k})}_{\text{Gewichtsfunktion}}$ (*)

Zusammenhang zur Fouriertransformation

allg: $$\psi(\underline{r})\Big|_{t=0} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k}\; e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, \phi(\underline{k}) \quad (**)$$

Darstellung der Wellenfunktion als Fourierintegral

d.h. $\underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\phi(\underline{k})}_{\text{Fourier-transformierte}} = \underbrace{f(\underline{k})}_{\text{Gewichtsfkt.}}$

Umkehrung:

$$\int d\underline{r}\; e^{-i\underline{k}'\cdot\underline{r}} \underbrace{\psi(\underline{r})}_{\psi(\underline{r})|_{t=0}} \overset{(**)}{=} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k}\; \phi(\underline{k}) \int d\underline{r}\; e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{r}}$$

benutze:
$$\delta(\underline{k}-\underline{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{r}\; e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{r}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{k}\; \phi(\underline{k})\,(2\pi)^3\, \delta(\underline{k}-\underline{k}') = (2\pi)^{3/2}\phi(\underline{k}')$$

$$\Rightarrow \phi(\underline{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\underline{r}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, \psi(\underline{r})\Big|_{t=0}$$

In der QM verwendet man in der Notation häufig statt $\underline{k}$ den Impuls $\underline{p} = \hbar \underline{k}$

benutze

$$d\underline{k} = dk_x\, dk_y\, dk_z = \hbar^{-3}\, dp_x\, dp_y\, dp_z = \hbar^{-3}\, d\underline{p}$$

und definiere: $\tilde{\psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2}\, \phi(\underline{k})$

$$\boxed{\begin{aligned} \Rightarrow \psi(\underline{r})\Big|_{t=0} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\, \tilde{\psi}(\underline{p}) \\ \tilde{\psi}(\underline{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\, \psi(\underline{r}) \end{aligned}}$$

Zurück zum Wellenpaket (bei $t=0$)

$$\psi(\underline{r})\Big|_{t=0} = \int d\underline{k}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, f(\underline{k})$$

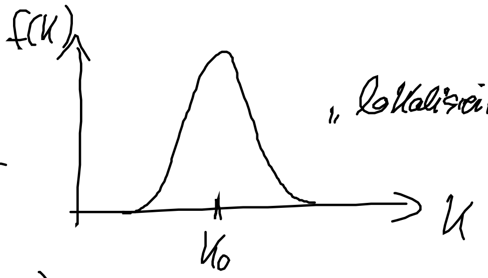
Bemerkung: mit $f(\underline{k}) \sim \delta(\underline{k}-\underline{k}_0)$

wäre $\psi(\underline{r})\big|_{t=0} \sim e^{i\underline{k}_0 \cdot \underline{r}}$

ebene Welle mit festem Wellenvektor $\underline{k}_0$!

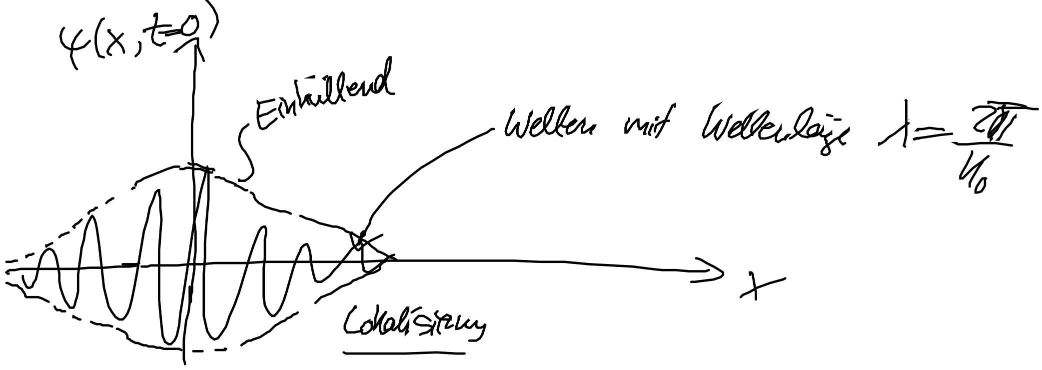
betrachte nun echtes „Paket“

in einer Dimension



„lokalisiert“ um $k=k_0$

(dominierende Wellenlänge)



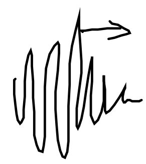
Frage

Wie verhält sich das Paket als Funktion der Zeit $(t>0)$?

Man unterscheidet

a) Phasengeschwindigkeit

$\Longleftrightarrow$ Geschw. der Wellenberge



in einer Dimension

$$v_{ph} \equiv \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k}\,\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{2m}$$

z.B. für freies Teilchen (kein Potential!)

Sei $f(k)$ „scharf gepeakt" um $k = k_0$

$$v_{ph} \approx \frac{\hbar k_0}{2m} = \frac{p_0}{2m}$$

Unterschied zur klass. Mechanik, wo $v = \frac{p}{m}$

dreidimensional: $\underline{v}_{ph} = \frac{\omega}{k} \underbrace{\hat{\underline{k}}}_{\text{Einheitsvektor in } k\text{-Richtung}}$

b) Gruppengeschwindigkeit

$\Leftrightarrow$ Geschw. der Einhüllenden

Annahme wie vorher:

$f(\underline{k})$ „gepeakt" (hat ausgeprägtes Maximum) bei $k = k_0$

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

entwickelt man die Größe $\omega = \omega(\underline{k})$ um den dominanten Wellenvektor $\underline{k}_0$

also:
$$\omega \approx \underbrace{\omega(\underline{k} = \underline{k}_0)}_{\omega_0 \text{ konstant}} + \nabla_{\underline{k}}\, \omega \Big|_{\underline{k} = \underline{k}_0} \cdot \overbrace{(\underline{k} - \underline{k}_0)}^{\Delta \underline{k}} + \mathcal{O}(\Delta \underline{k}^2)$$

Einsetzen:

$$\psi(\underline{r},t) = e^{i(\underline{k}_0\cdot\underline{r} - \omega_0 t)} \cdot \int d\underline{k}\, e^{i(\underline{k}-\underline{k}_0)\underline{r}} \times e^{-i\nabla_{\underline{k}}\omega\big|_{\underline{k}_0}(\underline{k}-\underline{k}_0)t + \dots}$$

Multiplikation

$$= \underbrace{e^{i(\underline{k}_0\cdot\underline{r} - \omega_0 t)}}_{\text{ebene Welle}} \cdot \underbrace{\tilde{E}(\underline{r},t)}_{\text{Einhüllende}}$$

$$\text{mit } \tilde{E}(\underline{r},t) = \int d\underline{k}\, e^{i(\underline{k}-\underline{k}_0)(\underline{r}-\nabla_{\underline{k}}\omega|_{\underline{k}_0} t) + \dots}$$

Interpretiere im Argument der Exponentialfunktion:

$$\underline{v}_g = \nabla_{\underline{k}}\omega\Big|_{\underline{k}_0}$$

Gruppengeschw.

speziell freies Teilchen

$$\underline{v}_g = \nabla_{\underline{k}} \frac{\hbar k^2}{2m}\Big|_{\underline{k}_0} = \frac{\hbar k_0}{m}\hat{\underline{k}}_0 = \frac{\underline{p}_0}{m} \;!$$

passt zur klass. Geschw. !

$$\Rightarrow \underline{r} - \nabla_{\underline{k}}\omega\Big|_{\underline{k}_0} t = \underline{r} - \underline{v}_G t$$

Frage:

Wie hängt die ganze Einhüllende von der Zeit ab?

$$\tilde{E}(\underline{r},t) = \int d\underline{k}\; e^{i\overset{\underline{k}-\underline{k}_0}{\Delta\underline{k}}\cdot(\underline{r} - \underline{v}_g t)}\; e^{i\frac{1}{2}\nabla_{k_i}\nabla_{k_j}\omega|_{\underline{k}_0}(\Delta k)^2 t} + \mathcal{O}(\Delta k^3)$$

Einbeziehung der höheren Terme in der Taylorentw. von $\omega(\underline{k})$

Man findet:

Die Einhüllende <u>verbreitert</u> sich mit der Zeit !!

$\Leftrightarrow$ das Wellenpaket zerfließt mit der Zeit

II.2. Die Schrödingergleichung

Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion $\psi(\underline{r},t)$

(nicht nur im kräftefreien Fall, sondern auch in Anwesenheit von Potentiale)

Anforderungen

i) Für den kräftefreien Fall sollen die Lösungen gerade ebene Wellen sein $\psi \sim e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

(bzw. Superposition ebener Wellen)

ii) Die Gleichung soll linear in ψ sein, damit das Superpositionsprinzip gilt

($\Rightarrow$ Beschreibung von Interferenzeffekten! und Konstruktion von Wellenpaket)

iii) Differentialgl. erster Ordnung in der Zeit!