

Bachelorsymposium 2018 : Mittwoch 25.04., 16.00
 EU 202

Welle-Teilchen Dualismus

insbes. : - Licht: Teilchencharakter

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

$$p = \hbar k$$

relativist. Teilchen, masselos

$$E = cp$$

($\omega = ck$)
 Dispersionsrelation

Materie, z.B.
 - Elektronen: Wellencharakter

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

(für freie Teilchen,
 nicht-relativistisch)

II. Schrödinger'sche Wellenmechanik

II.1. Materiewellen

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

Bestrahlung?

Einfachster Ansatz (\rightarrow Elektrodynamik)

Materiewelle als ebene Welle

(wie Lichtwellen
 im Vakuum!)

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

$$= A e^{i \frac{1}{\hbar} (p \cdot r - E t)}$$

„Wellenfunktion“

Aber:

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

Nächster Schritt:

Bilde "Wellenpaket" durch Überlagerung (Superposition) ebener Wellen

$$\psi(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} \underbrace{f(\underline{k})}_{\substack{\text{"Zunächst noch beliebige"} \\ \text{"Gewichtskultur"}}$$

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

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

Warum ist das so wichtig?

Deutung des Wellenpakets durch Max Born

Komplex konjugiert

⇒ 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 zu Zeit t im Volumenelement $d\underline{r}$ um \underline{r} zu finden

⇒ $|\psi(\underline{r}, t)|^2 d\underline{r}$ 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: ≤ 1 sein soll~~), 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 in Potentials)

dass nicht mehr alle Werte von k_x, k_y, k_z (Komponente von \underline{k})

möglich sind, sondern $k_\alpha = n_\alpha \frac{2\pi}{L}$ ($\alpha = x, y, z$)

n_α ganze Zahlen

$$L^3 = V$$

(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

$$t=0: \psi(\underline{r}, t=0) = \int d\underline{k} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} f(\underline{k}) \quad (*)$$

 Geschwindigkeit:

Zusammenhang zu 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 Fourierreintegral

d.h.
$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \phi(\underline{k}) = f(\underline{k})$$

 Fourier-
 transformiert Geschwindigkeit

Umkehrung:

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

benutze:

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

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

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

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 $\tilde{\Psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2} \Phi(\underline{k})$

$$\Rightarrow \Psi(\underline{x}) \Big|_{t=0} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p} e^{i/\hbar \underline{p} \cdot \underline{x}} \tilde{\Psi}(\underline{p})$$

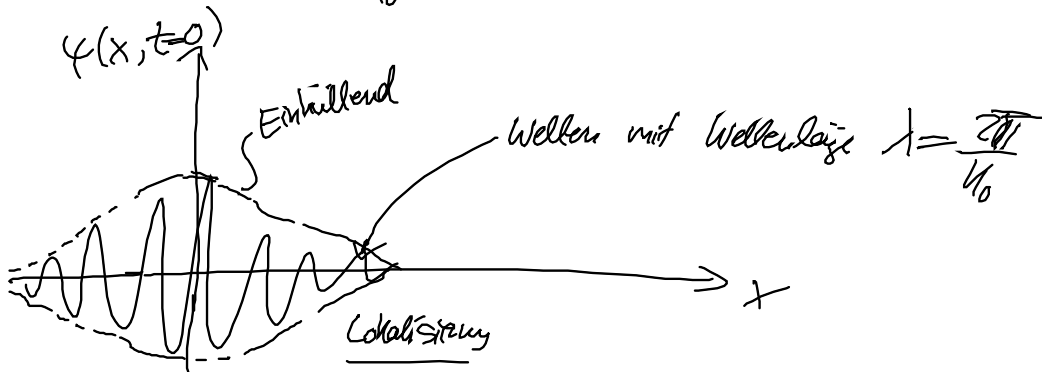
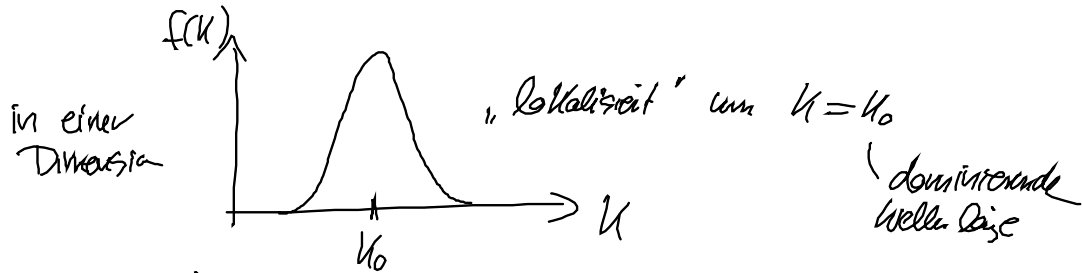
$$\tilde{\Psi}(\underline{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{x} e^{-i/\hbar \underline{p} \cdot \underline{x}} \Psi(\underline{x})$$

Zurück zum Wellenpaket (bei $t=0$)

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

Bemerkung: mit $f(k) \sim \delta(k - k_0)$
 wäre $\psi(x) \Big|_{t=0} \sim e^{i k_0 x}$
 ebene Welle mit
 festem Wellenvektor k_0 !

betrachte nun erstes "Paket"



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

Man unterscheidet

a) Phasengeschwindigkeit

\Leftrightarrow 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!)

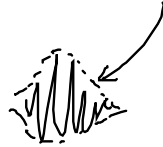
Sei $f(k)$ „scharf gepackt“ ~~ist~~ um $k = k_0$

$$v_{ph} \approx \frac{v k_0}{z_{m}} = \frac{p_0}{z_{m}}$$

Unterschied zur klass. Mechanik, wo $v = \frac{p}{m}$
 dreidimensional: $v_{ph} = \frac{\omega}{k} \hat{k}$ — Einheitsvektor in k Richtung

b) Gruppengeschwindigkeit

\Leftrightarrow Geschw. der Einhüllenden



Annahme wie vorher:

$f(k)$ „gepackt“ (hat ausgeprägtes Maximum)

bei $k = k_0$

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

entwickelt man die Größe $\omega = \omega(k)$ um den dominanten Wellenvektor k_0

also: $\omega \approx \underbrace{\omega(k=k_0)}_{\omega_0 \text{ Konstant}} + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \cdot \overbrace{(k-k_0)}^{\Delta k} + \mathcal{O}(\Delta k^2)$

Einsetzen:

$$\psi(\underline{r}, t) = e^{i(\underline{k}_0 \cdot \underline{r} - \omega_0 t)} \cdot \int d\underline{k} e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r}} \cdot e^{-i \left. \frac{\nabla_{\underline{k}} w}{k_0} \right|_{\underline{k}_0} (\underline{k} - \underline{k}_0) t + \dots}$$

Multiplikativ:

$$= e^{i(\underline{k}_0 \cdot \underline{r} - \omega_0 t)} \cdot \tilde{E}(\underline{r}, t)$$

ebene Welle Einhüllende

$i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot (\underline{r} - \left. \frac{\nabla_{\underline{k}} w}{k_0} \right|_{\underline{k}_0}) t + \dots$

mit $\tilde{E}(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e$

Interpretieren im Argument der Exponentialfunktion:

$$\frac{v_g}{\text{Gruppengesch.}} = \left. \frac{\nabla_{\underline{k}} w}{k_0} \right|_{\underline{k}_0}$$

speziell hier Teil durch

$$\frac{v_g}{\text{}} = \left. \frac{\nabla_{\underline{k}} \frac{\hbar k^2}{2m}}{k_0} \right|_{\underline{k}_0}$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m} \hat{k}_0 = \frac{p_0}{m} \quad !$$

passt zur klass. Geschw. !

$$\Rightarrow \underline{r} - \left. \frac{\nabla_{\underline{k}} w}{k_0} \right|_{\underline{k}_0} t = \underline{r} - \frac{v_g}{\text{}} t$$

Frage:

Wie hängt die ganze Einhüllende von der Zeit ab?

$$\tilde{E}(\underline{r}, t) = \int d\underline{k} e^{i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}} e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot (\underline{r} - \frac{v_g}{\text{}} t)} e^{i \frac{1}{2} \left. \frac{\nabla_{\underline{k}_i} \nabla_{\underline{k}_j} w}{k_0} \right|_{\underline{k}_0} \sqrt{E} (\Delta \underline{k})^2 + \mathcal{O}(\Delta k^3)}$$

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

Man findet:

Die Einhüllende verbreitert sich mit der Zeit !!

\Rightarrow 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 Potentialen)

Anforderungen

i) Für den Kräftefreien Fall sollen die Lösung 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 Wellenpaketen)

iii) Differentialgl. erste Ordnung in der Zeit!