E 4 22.4.08

2. Wellenmechanik

2.1.1 Die klassische Hamilton-Fkt.

zur Erinnerung (− war falsch)

$$\boxed{H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r})}$$

q : Ladung, (e ist positive Elementarlad.)

m : (Ruhe)Masse

$\vec{A}$ Vektorpotential } nicht Eindeutig

$V = q \cdot \phi$ Pot. Energie } ⇒ Versch-Eichungen

oder eindimensional (1D)

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

oder 1D mit $A = 0$

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

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$$

2.1.2 Hamilton-Operator (Ortsraumdarstellung)

Messgrößen („Observablen") G werden ersetzt durch Vorschriften („Operatoren")

$$G \longrightarrow \hat{G}$$

In dem man ersetzt:

$$\vec{r} \longrightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r}$$
$$\vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

also z.B. für den Hamilton-Operator $(\vec{A}=0)$

$$\boxed{H \longrightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})}$$

oder für den Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$\boxed{L \longrightarrow \hat{L} = \vec{r} \times (-i\hbar\vec{\nabla})}$$

2.1.3 Was wird gemessen?

In Kap 1.2 haben wir gesehen, dass der Ort eines Teilchens nicht "scharf" definiert sein darf.

Die relative Häufigkeit, ein Teilchen am Ort $\vec{r}$ zur Zeit t zu messen, ist proportional zu $|\psi(\vec{r},t)|^2$

Bei Normierung (nicht immer möglich)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3x = 1$$

kann $|\psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden.

Der Erwartungswert (Mittelwert) einer Observablen G ist gegeben durch

$$\boxed{\langle \hat{G} \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r},t)\, \hat{G}\, \psi(\vec{r},t)\, d^3x}$$

$$=: \underbrace{\langle \psi |}_{\text{„bra"}} \hat{G} \underbrace{| \psi \rangle}_{\text{„ket"}}$$

„bra" – „ket"

In jeder (idealen) Einzelmessung werden jedoch die Eigenwerte G_n von $\hat{G} \neq \hat{G}(t)$ gemessen mit

$$\hat{G}\, \psi_n = \underbrace{G_n}_{\text{Eigenwert}}\ \underbrace{\psi_n}_{\text{Eigenfkt}}$$

Nach der Messung ist das Teilchen im Zustand ψ_n

$\Rightarrow$ „Kollaps der Wellenfkt"

Aus physikalischer Sicht müssen alle möglichen Messwerte G_n reell sein (sind sie auch)

Man kann zeigen (hier ohne Beweis), dass die Eigenfkt. ψ_n ein vollständiges orthonormal-System bilden.

D. h. jede Fkt $\psi(\vec{r})$ kann dargestellt werden als

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{r})$$

und es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\vec{r})\, \psi_m(\vec{r})\, d^3r = \delta_{n,m}$$

$$=: \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$$

Die Wellenfkt. $\psi(\vec{r}, t)$ erhält man aus der Lösung Schrödingergleichung.

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

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$= 6{,}6256 \cdot 10^{-34}$ Js

Spezialfall $\qquad \hat{H} \neq \hat{H}(t)$ d. h. zeitunabhängig Problem

Ansatz: $\quad \psi(\vec{r}, t) = f(t) \cdot \psi(\vec{r})$

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

Einsetzen: $\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(f(t)\, \psi(\vec{r})\right) = \hat{H}\left(f(t) \cdot \psi(\vec{r})\right)$

$$\Rightarrow \quad \underline{\psi(\vec{r})} \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{f(t)} = \underline{f(t)}\, \hat{H}\left(\underline{\psi(\vec{r})}\right)$$

Zerlegen in 2 Gleichungen:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{H}\, \psi(\vec{r}) &= E\, \psi(\vec{r}) \\ i\hbar \frac{d}{dt} f(t) &= E\, f(t) \end{aligned}}$$

Stationäre Schrödinger-Gl.

Ansatz: $\quad f(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$

$$\psi(\vec{r}, t) = \underbrace{e^{-i \frac{E}{\hbar} t}}_{\text{zeitabhängig}} \cdot \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\text{zeitunabhängig}}$$

Beispiel - Rechnung

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n a_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(\vec{r})$$

(Anschauliche Bedeutung von a_n)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n a_n^* \exp(+i\frac{E_n}{\hbar}t)\, \psi_n^*(\vec{r})\right)\left(\sum_m a_m \exp(-i\frac{E_m}{\hbar}t)\, \psi_m(\vec{r})\right) d^3r$$

$$= \sum_{n,m} \exp\left(+i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t\right) a_n^* a_m \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\vec{r})\, \psi_m(\vec{r})\, d^3r}_{=\delta_{n,m}}$$

$$= \sum_n |a_n|^2 = 1$$

$|a_n|^2 \hat{=}$ Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand ψ_n zu finden.

=) Vermutung

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \sum_n |a_n|^2 \cdot E_n$$

(wie beim Würfel $\frac{1}{6}\cdot 1 + \frac{1}{6}\cdot 2 + \dots$)

Rechnung

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n a_n^* e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n^*(\vec{r})\right) \cdot \hat{H} \left(\sum_m a_m e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} \psi_m(\vec{r})\right) d^3r$$

$$= \sum_{n,m} e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t} a_n^* a_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \overbrace{\hat{H}\, \psi_m}^{E_m \psi_m(\vec{r})} d^3r$$

$$= \sum_{n,m} e^{i\frac{E_m - E_n}{\hbar}} a_n^* a_m E_m \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, d^3r}_{\delta_{n,m}}$$

$$= \boxed{\sum_n |a_n|^2 E_n = \langle \hat{H} \rangle_\psi}$$

Der Energieeigenwert E_n wird mit der Wahrscheinlichkeit $|a_n|^2$ gemessen

2.2 Eindimensionale Probleme

2.2.1 Analogie zu EM-Wellen bzw. Optik

Physik II + III: Wellengleichung der E-Dyn.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \underset{\text{El. Feld}}{E(x,t)} - \frac{1}{\underset{\text{lokale Phasengeschwind.}}{c^2(x)}} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(x,t) = 0$$