2. Schrödinger-Gleichung, Korrespondenzprinzip, Unitarität

2.1 De Broglie-Wellengleichung (Vorübung)

Superpositionsprinzip $\rightarrow$ $\psi(\vec{x},t)$ erfüllt lineare homogene Diff. gl.

Fourierzerlegung nach $e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}$

$$\left.\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \\ \vec{\nabla}_x \Rightarrow i\vec{k} \end{array}\right\} \quad \text{lin. Diff.-gl.} \Leftrightarrow \omega(\vec{k})$$

$$\psi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \tilde{\psi}(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} \quad \text{mit } \omega = \omega(\vec{k})$$

erfüllt Diff. gl.

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \omega\left(\frac{\vec{\nabla}}{i}\right)\psi$$

bzw. $$-\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \omega^2\left(\frac{\vec{\nabla}}{i}\right)\psi \quad \text{(Wellengleichung)}$$

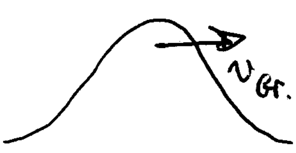
$\rightsquigarrow$ spätere Diskussion

$\tilde{\psi}(\vec{k})$ sei um $\vec{k}_0$ konzentriert $\rightsquigarrow$ "Wellenberg"

$$\omega(\vec{k}) = \omega(\vec{k}_0) + \left.\frac{d\omega}{d\vec{k}}\right|_{\vec{k}=\vec{k}_0}(\vec{k}-\vec{k}_0) + \dots$$

Üb. Gaussförmiges Wellenpaket

$$\psi(\vec{x},t) \cong e^{-i\left(\omega(\vec{k}_0) - \left.\frac{d\omega}{d\vec{k}}\right|_{\vec{k}=\vec{k}_0}\cdot \vec{k}_0\right)t} \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot\overbrace{\left(\vec{x}-\left.\frac{d\omega}{d\vec{k}}\right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} t\right)}^{!}}\, \tilde{\psi}(\vec{k})}$$



$v_{Gr.}$ mit der Gruppengeschwindigkeit $\quad \boxed{\vec{v}_{GR} = \left.\frac{d\omega}{d\vec{k}}\right|_{\vec{k}=\vec{k}_0}}$

"Korrespondenzprinzip" $\frac{d\omega}{d\vec{k}} = \vec{v}_{gr} = \frac{\vec{p}}{m}$

Wellenbild Teilchenbild

(wir 'raten' die übergeordnete QM aus der Mechanik)

Annahme $\underset{\sim\sim\sim}{E = \hbar\omega}$ $\rightarrow$ $\frac{d(\hbar\omega)}{d\vec{k}} = \frac{dE}{d\vec{k}} = \frac{d\frac{\vec{p}^2}{2m}}{d\vec{k}}$

$\overset{!}{=} \hbar \frac{\vec{p}}{m}$

Korresp.-P.

$\rightarrow \underset{\sim\sim\sim}{p = \hbar k}$ (Schluss lässt sich auch umdrehen)

(De Broglie 1923)

haben also: $\omega(\vec{k}) = \frac{1}{2m}\hbar k^2$

und damit die De Broglie-Wellengleichung ("freie Schrödinger Gl.)

! i tritt in einer phys. Gl. auf !!

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\vec{\nabla}}{i}\right)^2 \psi(\vec{x},t)$$

$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar\nabla}{i}$ in mechanischer Gleichung $E = \frac{p^2}{2m}$

Bem kann $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und v_{gr} messen

$\vec{v}_{gr} = \eta\vec{k}$ mit $\eta = \hbar/m$ $\rightarrow$ $\vec{p} = \hbar k$, $E = \hbar\omega$!

relativistische Teilchen / im Extrem Photonen : rel. Mechanik $c^2 p^2 + m^2c^4 = E^2$

(i) $\rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$ 2. Ordnung in Zeit (hier nicht zu vermeiden!)

(ii) $\rightarrow$ kein Teilchenzahlerhaltung? [illegible]

$$\lambda(e^-)\,[\text{Å}] = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \approx \frac{12{,}25}{\sqrt{E[eV]}}$$

$$\lambda(p,n) \approx \frac{0.28}{\sqrt{E[eV]}}$$

$$\lambda(X) = \frac{hc}{E} \approx \frac{12.4}{E[keV]}$$

Wdhl. Superpositionspr. $\longrightarrow$ lin. hom. Diff-gl.

Fourierentwicklung .. $e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}$

Diff. Gl. $\longleftrightarrow$ $\omega = \omega(\vec{k})$ Dispersionsrelation

$$\vec{v}_{Gr} = \left.\frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}}\right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \sim \frac{\vec{p}}{m} \quad \text{Korrespondenzprinzip}$$

Bem. falls wir bei der Entwicklung von $\omega(\vec{k})$ nicht nur den ersten Grad abbrechen $\rightarrow$ Auseinanderfließen (Üb. Gaußsches Wellenpaket)

$$\underline{E = \hbar\omega} \rightarrow \underline{\vec{p} = \hbar\vec{k}} \quad \text{De Broglie}$$

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

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

$\downarrow$ freie Schrödinger-Gl.

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\underbrace{\left(\frac{\hbar\vec{\nabla}}{i}\right)^2}_{-\hbar^2\Delta}\psi(\vec{x},t)$$

$$-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$$

imaginär!

Typ "Wärmeleitungsgleichung", aber imaginärer Koeff.! ψ ist i.a. komplex!

Wellengleichung - E-dyn. $E^2 = c^2p^2$

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

(i) $\hbar^2$ fällt heraus!

(ii) 2. Ableitung in der Zeit

verändertes Anfangswertproblem!

! (iii) keine Wahrscheinlichkeits-interpretation

aber — Schwierigkeiten bei der Wahrscheinlichkeitsinterpretation
(~> relativistische Quantenmechanik ?? Feldwerk; Dirac-Gl.)
— damit zusammenhängend: Teilchenproduktion → Quantenfeldtheorie
→ worldline meth.

wir beschränken uns hier auf nichtrelativistische Teilchen — 1, 2 .. Teilchensysteme (auch die sog. makroskopische Schrödinger-Gl. ist letztlich nur mit der Quantenfeldtheorie zu verstehen)
aber: die grundlegenden Prinzipien der QM werden allgemein gültig sein.
(zu erklären!)

2.2 Korrespondenzprinzip (→ Ham.-Jacobi Form. der Mechanik), Schrödinger-Gleichung.

QM sollte die übergeordnete Theorie sein, aus der die Mechanik folgt; können sie also nicht ableiten, bestenfalls heuristische Betrachtungen.

2.2.1 Mechanik soll im Grenzfall der "geometrischen Optik" aus der QM folgen: betrachte nichtrelativistischen Vorgang (e-Strahl), die Wellengleichung soll im limes der geom. Optik (eine Dispersionsbeziehung verallgemeinert ~> Eikonalnäherung) den Bewegungsvorgang nach den Gesetzen der "klassischen" Mechanik liefern.

technisch: Ansatz (A) $\psi(\vec{x},t) = \psi_0\, e^{i(\hat{S}(\vec{x},\omega) - \omega t)}$

mit (i) vernachlässige 1. Ableitungen in ψ_0
(ii) 2. Ableitungen in $\hat{S}$ } in Wellengleichung

"Eikonalnäherung" der geom. Optik

Erinnere: $A = A_0\, e^{i(\underbrace{\vec k(\omega,\vec x)\cdot\vec x}_{\hat S} - \omega t)}$ mit

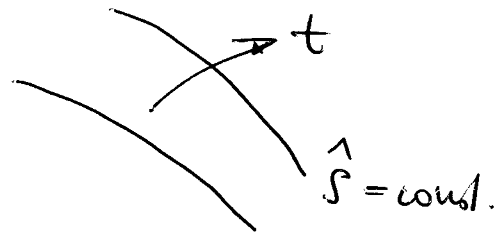
(Optik) $\vec k(\omega,\vec x) = \vec k_{vac}(\omega)\, \underbrace{n(\omega,x)}$

$\vec k_{vac}$: $\frac{2\pi}{\lambda} \sim \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{\omega}{c}$

Brechungsindex bei Isotropie des Raumes sei langsam veränderlich

$\Rightarrow$ Diff-Gl. für $\hat S(\vec x,\omega)$

$\sim$ fortschreitende Wellenfronten



(B) ähnliche Formulierung in der Hamilton-Jacobi-Theorie der klassischen Mechanik

Wirkungsfunktion $$S(\vec x,t) = \int^{(\vec x,t)} dt\, \mathcal{L}(\vec x,\dot{\vec x})$$

$$= S_0(\vec x) - Et$$ für konservative Systeme

$\sim$ erfüllt Ham.-Jac. Diff-Gl. (* S. 14', 14' → Übung)

Bem.: $\oint p\,dq = \oint \frac{\partial S}{\partial q}\,dq$ → Bohr-Postulat

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\overbrace{H}^{\text{Hamilton-Funktion}}\Big(\vec x, \underbrace{\frac{\partial S_0}{\partial \vec x}}_{=\vec p}\Big) = -E \quad \text{im konserv. Fall}$$

will S_0 mit $\hat S$ und ω mit E identifizieren, muß dazu schon aus Dimensionsgründen (Wirkung S! mit einer dimensionierten Größe - eben Planckschen Wirkungsquantum $\hbar$ multiplizieren

$$\boxed{\begin{aligned} S_0 &= \hbar\, \hat S \\ E &= \hbar\omega \end{aligned}}$$

die Ham.-Jacobi Diff-Gl. entspricht dann der Eikonalnäherung

von $$\underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi}_{\underbrace{\hbar\omega}_{E}\psi} = H(\vec{x}, \underbrace{\tfrac{\hbar}{i}\vec{\nabla}}_{\downarrow \text{ Eikonalnäherung: } \frac{\partial S_0}{\partial \vec{x}}})\,\psi(\vec{x},t)$$: die Schrödinger-Gleichung.

(keine höheren Ableitungen!)

Nach diesem Prinzip ersetzt man also (heuristisch!)

$$\left.\begin{aligned} E &\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \end{aligned}\right\}$$ "Korrespondenzprinzip"

$$\text{in } H(\vec{x},\vec{p}) = E\ !$$

und wendet das auf ein $\psi(\vec{x},t)$ an.

Daß sich damit eine (nach heutigem Wissen) exakte Gleichung für die Wellenfunktion ergibt, ist höchst erstaunlich! Wir ~~hatten~~ lediglich einen vernünftigen "klassischen" Limes gefordert.

2.2.2 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit ("Unitarität")

(– kompliziert für Prozesse mit Teilchenerzeugung)

– einfach für 1-Teilchenproblem (verallg. auf feste n-Teilchen leicht!)

hier $$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}} + V(\vec{x})$$ (ist ein linearer (Differential) Operator)

$$\frac{d}{dt}\int_V d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t) \underset{V\text{ fest}}{=} \int_V d^3x\,\{\dot\psi^*\psi + \psi^*\dot\psi\}$$

Schrödinger-Gl. $i\hbar\dot\psi = \underset{\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}+V(\vec{x})\right)}{H_{op}}\psi$ $\quad -i\hbar\dot\psi^* = (H_{op}\psi)^*$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_V \{(H_{op}\psi)^*\psi - \psi^*(H_{op}\psi)\}\,d^3x$$

$V(\vec{x})$ reell $\rightarrow$ fällt heraus

$$= \frac{i}{\hbar}\int_V d^3x\, \left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2\psi\right)^*\psi - \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2\psi\right)\right\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_V d^3x\,\{\vec\nabla\cdot\{(\vec\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\vec\nabla\psi\}\}$$

(einmal Abl. Green'sche Sätze ..)

$$\overset{\text{Gauß}}{=} -\int_{O} \vec{j}(\vec{x},t)\cdot d\vec{f}$$

$\Rightarrow 0$ für Integration über $\mathbb{R}_3$

mit $\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{i\hbar}{2m}\left((\vec\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\vec\nabla\psi\right)$

$V = \mathbb{R}_3$

$\rightarrow \int_{\mathbb{R}_3} d^3x\,\psi^*\psi$ zeitunabh. $= 1$ konvention

V endlich, beliebig : $\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\vec\nabla\vec{j}}$

Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte

" $\partial^\mu j_\mu = 0$ "

Bem. $\int_{\mathbb{R}_3} d^3x\,\{(O\psi)^*\psi - \psi^* O\psi\} = 0 \Rightarrow$ "H ist hermitesch"

definiert hermiteschen (symm.) Operator