3.1. Die freie Schrödinger-Gleichung (SG)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \psi \quad \text{mit } \underline{\nabla}^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}} \quad (3.1)$$

- Lsg: de Broglie-Welle: $\psi(\underline{r},t) = A\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ (3.2)

  mit $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ✓

3. 2. Wellenpakete

b) Fourier-Transformation (1 dim): „Entwicklung nach ebenen Wellen"

- Satz: Geg: stückweise, stetiges $f(x)$ mit $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)| < \infty$ (*)

  $\longrightarrow$ Fourier-Transformierte: $\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} f(x)\, e^{-ikx}$

  $\xrightarrow{\text{o.B.}}$ Fourier-Entwicklung: $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k)\, e^{ikx}$

- Bem: (i) „absolute Integrierbarkeit" (*): hinreichend, nicht notwendig

  (ii) Konvention: $\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \ldots, \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ … „normierte" Eigen-Fkt.

  sonst: $\int dx \ldots, \int \frac{dk}{2\pi} \ldots$

  (iii) $\boxed{f(x) \in \mathbb{R} \longrightarrow \tilde{f}(-k) = \underbrace{\tilde{f}^*(k)}_{\text{konjugiert-komplex zu } \tilde{f}(k)}}$ (3.5)

- Parsevalsches Theorem:

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Geg: } f(x),\ g(x) \text{ und } \bar f(k),\ \bar g(k) \\ \longrightarrow \int dx\, f^*(x)\, g(x) = \int dk\, \bar f^*(k)\, \bar g(k)\end{array}} \quad (3.6)$$

Beweis: $\int dx\, f^*(x) g(x) \overset{(3.4)}{=} \iiint dx \frac{dk}{2\pi} \frac{dk'}{2\pi}\, \bar f^*(k') \bar g(k)\, e^{i(k-k')x}$

NB: $\left(e^{ik'x}\right)^* = e^{-ik'x}$

$$= \iint dk\, dk'\, \bar f^*(k') \bar g(k)\, \delta(k-k')$$

$$= \int dk\, \bar f^*(k) \bar g(k) \quad \text{qed}$$

· 3D:

$$\boxed{\begin{array}{l} f(\underline{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \bar f(\underline{k})\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \\ \qquad \underline{k}\cdot\underline{r} = k_x x + k_y y + k_z z \\ \text{mit } \bar f(\underline{k}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^{3/2}}\, f(\underline{r})\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} \end{array}} \quad (3.7)$$

c) Wellenpaket: i.f. $\underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$

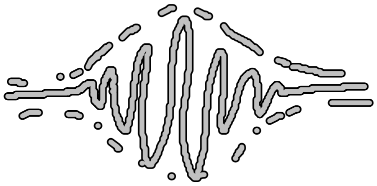
· Paket bei $t=0$:

$$\psi(\underline{r},0) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \bar\psi(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$$\text{mit } \bar\psi(\underline{p}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \psi(\underline{r},0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

NB: $\hbar \xrightarrow[\text{in}]{\text{skaliert}} \frac{x}{\sqrt{\hbar}}, \frac{p}{\sqrt{\hbar}}$ etc

• $\psi(r,0) \mathrel{\hat{=}}$



„lokalisiertes Teilchen"
$\mathrel{\hat{=}}$ Überlagerung ebener Wellen

• Zeitentwicklung: SG (3.1): für jede ebene Welle: Faktor $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \bar{\Psi}(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et)}$$

$$\text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

• $\bar{\Psi}(\underline{p})$ ... Amplitude einer Welle mit Impuls $\underline{p}$ ⟶

$|\bar{\Psi}(p)|^2 d^3p$ ... Wahrscheinlichkeit, Teilchen mit Impuls $\underline{p}$ im Impulsvolumen d^3p vorzufinden. (3.10)

Normierung: $\int d^3p\, |\bar{\Psi}(\underline{p})|^2 = 1$ (3.11)

Beweis (3.11): $\int d^3p\, |\bar{\Psi}(\underline{p})|^2 = \int d^3p\, \psi^*(\underline{p})\,\psi(\underline{p}) \underset{\text{Parseval}}{\overset{(3.6)}{=}} \int d^3r\, \psi^*(\underline{r})\,\psi(\underline{r}) = \int d^3r\, |\psi(\underline{r})|^2 \overset{(2.4)}{=} 1$

• Sprache: „$\bar{\Psi}(\underline{p}) \mathrel{\hat{=}} \psi(\underline{r})$ projiziert auf Impulszustand"

Wahrscheinlichkeiten $\xrightarrow{\text{Kap. 2.4}}$

<u>a) Mittelwerte</u>: • Was beobachtet man bei Mittelung über Ensemble vieler, gleicher Systeme/Teilchen?

• mittlere Ort: $\langle \underline{r} \rangle = \int d^3r\, \underline{r}\, |\psi(\underline{r},t)|^2$ (3.12)

" Impuls: $\langle \underline{p} \rangle = \int d^3p\, \underline{p}\, |\bar{\Psi}(\underline{p},t)|^2$ (3.13)

} vgl. Kap. 2.4 (2.23)

„Unschärfe" aus mittlerer quadrat. Abweichung: vgl. (2.29)

$$(\Delta r)^2 := \langle [\underline{r} - \langle \underline{r} \rangle]^2 \rangle = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \quad (3.14)$$

$$(\Delta p)^2 := \langle [\underline{p} - \langle \underline{p} \rangle]^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \quad (3.15)$$

• pathologisches Bsp:

(i) $$\psi(\underline{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}_0\cdot\underline{r} - Et)} \qquad (3.16)$$

$$\left.\begin{aligned} \longrightarrow \langle \underline{r} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3}\, 1\, \underline{r} \quad \text{"}= 0\text{"} \\ (\Delta r)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3}\, \underline{r}^2 \quad \text{"}= \infty\text{"} \end{aligned}\right\} (3.17)$$

≙ "Teilchen ist überall"!

(ii) $$\bar{\psi}(\underline{p},t) \overset{(2.8)}{=} \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \psi(\underline{r},t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$$= \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underbrace{(\underline{p}_0-\underline{p})\cdot\underline{r}}_{(\;)_x x + (\;)_y y + (\;)_z z}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

mit $\frac{1}{2\pi}\int d\frac{x}{\hbar}\, e^{i(p_{0x}-p_x)\frac{x}{\hbar}} = \delta(p_{0x}-p_x)$!

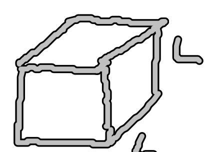
$$\longrightarrow \bar{\psi}(\underline{p},t) = \delta(p_{0x}-p_x)\,\delta(p_{0y}-p_y)\,\delta(p_{0z}-p_z)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\longrightarrow \bar{\psi}(\underline{p},t) = \delta(\underline{p}_0-\underline{p})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad (3.18)$$

≙ Teilchen mit scharfem Impuls $\underline{p}_0$!

Achtung: $\langle \underline{p} \rangle$, $(\Delta p)^2$ existieren nicht!

• Bsp II: „freies Teilchen" im Volumen $V = L\times L\times L$



& periodische Randbed. z.B. $\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z)$ L

$$\longrightarrow \psi(\underline{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}_0\cdot\underline{r} - Et)} \qquad (3.19)$$

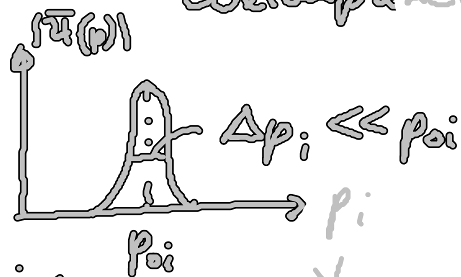
$\underbrace{p_{0i} = \hbar\,\frac{2\pi}{L}\, n_i}_{\text{nur diskrete } \underline{p}\text{!!!}}$, $i = x,y,z$; $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\left.\begin{aligned} \longrightarrow \langle r \rangle &= 0 \\ (\Delta r)^2 &= \left(\frac{L}{2}\right)^2 \end{aligned}\right\} (3.20)$$

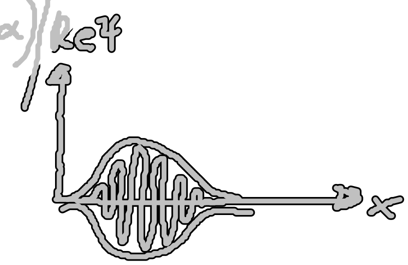
s. Übungen

e) <u>Gruppengeschwindigkeit</u> $\underline{v}_{gr}$: „Geschw. eines Wellenpakets"

• Sei $\bar{\Psi}(\underline{p}) = |\bar{\Psi}(\underline{p})|\, e^{i\alpha(\underline{p})}$



$$\rightarrow \Psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, |\bar{\Psi}(\underline{p})|\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et + \hbar\alpha)}$$



(i) "fast alle" $\underline{r}$: starke Oszillationen des Integr. $e^{\cdots}$ bei Variation von $\underline{p}$ $\longrightarrow \Psi(\underline{r},t) \approx 0$

(ii) $\Psi(\underline{r},t)$ maximal um $\underline{r} = \underline{r}_m$, wenn alle Partialwellen $e^{\cdots}$ gleiche Phasen bei Variation von $\underline{p}$

$\hat{=}$ Methode der stationären Phase.

$$\boxed{\nabla_{\underline{p}}\left(\underline{p}\cdot\underline{r} - Et + \hbar\alpha\right)\Big|_{\underline{p}_0} = 0}$$

Maximum / Zentrum von $\Psi(\underline{r},t)$:

$$\boxed{\underline{r}_m = \underline{v}_{gr}\, t + \underline{r}_0 \quad \text{mit} \quad \underline{r}_0 = -\hbar\, \underline{\nabla}_p\, \alpha(p)\Big|_{p_0}}$$

$$\boxed{\underline{v}_{gr} = \underline{\nabla}_p E(\underline{p})\Big|_{\underline{p}_0} = \underline{\nabla}_k\, \omega(\underline{k})\Big|_{\underline{p}_0 = \hbar \underline{k}_0}} \qquad (2.23)$$

[vgl. Kap 2.2]

... Gruppengeschw.

Deutung: $\underline{r}_m(t) \approx \langle \underline{r} \rangle (t)$ ... „Ort des klass. Teilchens"

$\underline{v}_{gr} = \underline{\nabla}_k\, \omega(\underline{k})\Big|_{\underline{k}_0} = \frac{\hbar \underline{k}_0}{m} = \frac{\underline{p}_0}{m} \approx \frac{\langle \underline{p} \rangle}{m}$ ... „Geschw. des klass. Teilchens"

[vgl. (2.20)]