3.1. Die freie Schrödinger-Gleichung (SG)

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

· 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:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Geg: stückweise, stetiges } f(x) \text{ mit } \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)| < \infty \quad (*) \\ \longrightarrow \text{Fourier-Transformierte: } \tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} f(x) e^{-ikx} \\ \xrightarrow{\text{o.B.}} \text{Fourier-Entwicklung: } f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k) e^{ikx} \end{array}}$$

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

(ii) Konvention: $\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \ldots$, $\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \ldots$ „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:

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

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

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:

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

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: $\hbar \xrightarrow[\text{in}]{\text{stecke}} \frac{x}{\sqrt{\hbar}}, \frac{p_x}{\sqrt{\hbar}}$ etc

- $\psi(\underline{r},0) \mathrel{\hat{=}}$

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

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

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

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

- $\overline{\psi}(\underline{p})$ ... Amplitude einer Welle mit Impuls $\underline{p} \longrightarrow$

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

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

Beweis: (3.11): $\int d^3p\, |\overline{\psi}(\underline{p})|^2 = \int d^3p\, \psi^*(\underline{p})\, \psi(\underline{p})$

$$\underset{\text{Parseval}}{\overset{(3.6)}{=}} \int d^3r\, \psi^*(\underline{r})\, \psi(\underline{r}) = \int d^3r\, |\psi(\underline{r})|^2 \overset{}{\underset{(2.24)}{=}} 1$$

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

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

d) **Mittelwerte**: „Was beobachtet man bei Mittelung über Ensemble vieler, gleicher Systeme / Teilchen?"

- mittlerer Ort: $\langle \underline{r} \rangle = \int d^3r\ \underline{r}\, |\psi(\underline{r},t)|^2$ (3.12)
- " Impuls: $\langle \underline{p} \rangle = \int d^3p\ \underline{p}\, |\overline{\psi}(\underline{p},t)|^2$ (3.13)

vgl. Kap. 2.4 (2.29)

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

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

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

- pathologisches Bsp:

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

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

$\hat{=}$ "Teilchen ist überall"!

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

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

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

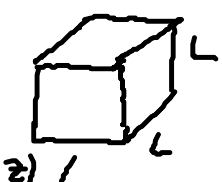
$$\longrightarrow \overline{\psi}(\underline{p},t) = \delta(p_{0x}-p_x)\,\delta(p_{0y}-p_y)\,\delta(p_{0z}-p_z)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

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

$\hat{=}$ 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. $\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z)$

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

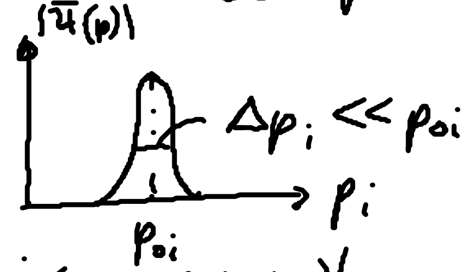
$\underbrace{p_{0i} = \hbar\frac{2\pi}{L} n_i}_{\text{nur diskrete } \underline{p}\,!!!}$, $i = x,y,z$, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

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

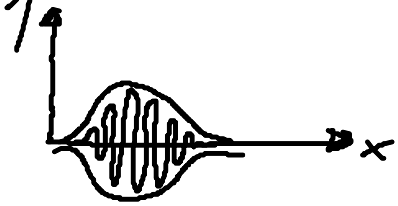
s. Übungen

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

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



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



(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.

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

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

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

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

[vgl. Kap 2.2a]

... Gruppengeschw.

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

$$\underline{v}_{gr} = \nabla_{\underline{k}} \omega(\underline{k})\Big|_{\underline{k}_0} = \frac{\hbar \underline{k}_0}{m} = \frac{\underline{p}_0}{m} \approx \frac{\langle \underline{p} \rangle}{m}$$

.. „Geschw. des klass. Teilchens" [vgl. (2.20)]