Normierung der Impulseigenzustände $|\varphi_p\rangle \equiv |p\rangle$

derart, dass

$$\boxed{\mathbb{1} \overset{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \, |p\rangle\langle p|} \qquad (1)$$

bedingt, dass

$$\boxed{\langle p | p' \rangle = 2\pi\hbar \, \delta(p-p')}$$

bisher Darstellung der Zustände im Ortsraum:

$$|\psi\rangle = \int dx \, \psi(x) \, |x\rangle \, ,$$

mittels (1) erhalten wir:

Impulsraumdarstellung eines Zustands

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} \, |\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \, |p\rangle \underbrace{\langle p | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p)}$$

mit $\tilde{\psi}(p) := \langle p | \psi \rangle$ also

$$\boxed{|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \, \tilde{\psi}(p) \, |p\rangle}$$

beachte:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \langle p | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int dx \, \underbrace{\langle p | x \rangle}_{=\varphi_p(x)^*} \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{=\psi(x)}$$

wg. $\varphi_p^*(x) = \left(e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right)^* = e^{-ipx/\hbar}$ erhalten wir

$$\boxed{\tilde{\psi}(p) = \int dx \, e^{-i\frac{px}{\hbar}} \, \psi(x)}$$

d.h. $\tilde{\psi}(p)$ ist die Fourier-Transformierte von $\psi(x)$

(bis auf $\hbar$: $k = p/\hbar$)

Umkehr-Trafo: $\tilde{\psi}(p) \longrightarrow \psi(x)$?

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\mathbb{1}|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \underbrace{\langle x|p\rangle}_{= e^{ipx/\hbar}} \underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{= \tilde{\psi}(p)}$$

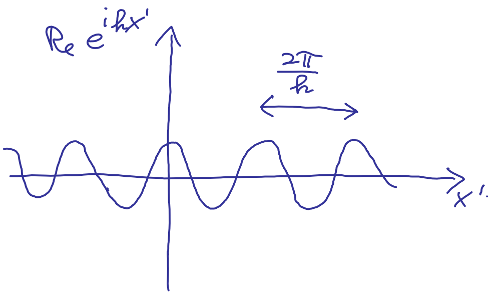
d.h. $$\boxed{\psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{i\frac{p x}{\hbar}}\, \tilde{\psi}(p)}$$

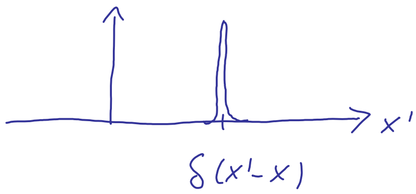
äquivalente Darstellung eines Teilchenzustands $|\psi\rangle$ in Impuls- bzw. Ortsbasis betont Wellen- bzw. Teilchenaspekte der „Materie":

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \tilde{\psi}(p)\, |p\rangle \overset{!}{=} |\psi\rangle \overset{!}{=} \int dx\, \psi(x)\, |x\rangle$$

Welle der Wellenzahl $k = \frac{p}{\hbar}$

Teilchen am Ort x





$\longleftrightarrow$ „Welle – Teilchen – Dualismus" ...

⌈ Analogie im SG-Experiment:

$$\alpha|\psi_+\rangle + \beta|\psi_-\rangle \overset{!}{=} |\psi\rangle \overset{!}{=} \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}|\varphi_+\rangle + \frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}|\varphi_-\rangle$$!


⌋

Kommutator

Def.: $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ ist der Kommutator

der Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$.

q.-m. Relevanz:

- $$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_{|\psi(t)\rangle}$$
- $\hat{A}$ Erhaltungsgröße $\Leftrightarrow$ $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$
- $\hat{A}$ translationsinvariant $\Leftrightarrow$ $[\hat{p}, \hat{A}] = 0$

$\vdots$

Kommutator $[\,,\,]$ entspricht damit Poisson-Klammer $\{\,,\,\}$ der Hamiltonschen Mechanik: $\{f, g\} := \sum_i \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i}$

- $$\frac{dA}{dt} = \{H, A\} \quad \left(+ \frac{\partial A}{\partial t}\right)$$
- A Erhaltungsgröße $\Leftrightarrow$ $\{H, A\} = 0$
- A translationsinv. $\Leftrightarrow$ $\{p, A\} = 0$

$\vdots$

Sehr bemerkenswert ist daher die ebenfalls vorhandene algebraische Entsprechung von Poisson-Klammer u. Kommutator:

$\{\ ,\ \}$	$[\ ,\ ]$
• $\{f,g\} = -\{g,f\}$	• $[A,B] = -[B,A]$
• $\{f,g+h\} = \{f,g\} + \{f,h\}$	• $[A,B+C] = [A,B] + [A,C]$
• $\{f,\lambda g\} = \lambda\{f,g\}$	• $[A,\lambda B] = \lambda[A,B]$
• $\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$	• $[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$
$\vdots$	$\vdots$

Mathematik: in beiden Fällen handelt es sich um eine <u>Lie-Klammer</u>.

"<u>Korrespondenz</u>"!

→ es gibt <u>strukturelle Ähnlichkeiten</u> zwischen klassischer Mechanik und QM; etwa der Zusammenhang von Symmetrien u. Erhaltungsgrößen.

<u>Bsp</u>: Hamiltonian translationsinvariant

$\Longleftrightarrow$ Impuls ist erhaltend

(vgl. Üb.)

<u>Kommutator von Ort und Impuls</u>

Mechanik: $\{p,x\} = 1$, d.h. p und x sind kanonisch konjugierte Variablen

wegen $\hat{p} = i\hbar \frac{d}{da}\hat{T}_a\Big|_{a=0}$ betrachte zuerst $[\hat{x},\hat{T}_a]$:

$$[\hat{x},\hat{T}_a]\,|x\rangle = \hat{x}\underbrace{\hat{T}_a|x\rangle}_{|x+a\rangle} - \hat{T}_a\underbrace{\hat{x}|x\rangle}_{=x|x\rangle} = (x+a)|x+a\rangle - x|x+a\rangle$$

$$= a|x+a\rangle = a\hat{T}_a|x\rangle\,;\quad \text{d.h. } [\hat{x},\hat{T}_a] = a\hat{T}_a$$

$$\rightarrow\ [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\frac{d}{da}[\hat{x},\hat{T}_a]\Big|_{a=0} = i\hbar\frac{d}{da}(a\hat{T}_a)\Big|_{a=0} = i\hbar\mathbb{1}$$

also: $$\boxed{[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}}$$

Schrödinger-Gleichung eines Punktteilchens

Freies klassisches Teilchen gekennzeichnet durch:

(i) Erhaltung von Energie E und Impuls p

(ii) Energie-Impuls-Beziehung (nicht-rel.):

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

wegen oben erwähnter strukt. Ähnlichkeit ("Korrespondenz") erwarten wir dasselbe in der q.m. Beschreibung des freien Teilchens, d.h.

(i') Erhaltung von $\hat{p}$ und $\hat{H}$

(ii') $$\langle\hat{H}\rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle_{|\psi\rangle} \quad \text{für alle } |\psi\rangle$$

beides offenbar gegeben, wenn

$$\boxed{\hat{H} \overset{!}{=} \frac{\hat{p}^2}{2m}}$$

$\rightarrow$ Schrödinger-Gl. des freien Teilchens (1D):

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi(t)\rangle}$$

im Ortsdarstellung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)}$$

Γ $\psi(x,t) := \langle x|\psi(t)\rangle$, $\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ $\lrcorner$

offenbar ist Impulseigenzustand $|p\rangle$ zugleich Energie-eigenzustand zur Eigenenergie $E_p = p^2/2m$, denn

$$\hat{H}|p\rangle \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m}|p\rangle = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{= E_p}|p\rangle \; .$$

$\rightarrow$ im Impulsdarstellung $\equiv$ Energiedarstellung erhalten wir für Anfangszustand

$$|\psi(0)\rangle = \int\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,|p\rangle$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx\, e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,\psi(x)$$

den Zustand zur Zeit t durch

$$|\psi(t)\rangle = \int\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,e^{-i\frac{p^2}{2m}t/\hbar}\,|p\rangle$$

d.h

$$\psi(x,t) \equiv \langle x|\psi(t)\rangle = \int\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,e^{-i\frac{p^2}{2m}t/\hbar}\,\langle x|p\rangle$$

mit $\langle x|p\rangle = e^{i\,px/\hbar}$ also

$$\boxed{\psi(x,t) = \int\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}t - px\right)}}$$

Integral kann für Gaußsche Wellenfkt $\psi_0(x) = e^{-x^2/4\sigma^2}$. ↗

explizit berechnet werden. (vllt. als Übung)

Im allg. Fall beinhaltet $\hat{H}$ neben kinetischer Energie $\hat{p}^2/2m$ auch potenzielle Energie, beschrieben durch herm. Operator $\hat{V}$; somit

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} \, .$$

falls klassisch Potenzialfunktion $V(x)$ vorliegt, erwarten wir

$$\langle \hat{V} \rangle_{|\psi\rangle} \overset{!}{=} \int dx \, |\psi(x)|^2 \, V(x)$$

$$= \int dx \, \psi^*(x) \, V(x) \, \psi(x) \equiv \langle \psi, \hat{V} \psi \rangle$$

d. h. $\hat{V}$ operiert in Ortsdarstellung gemäß

$$\psi(x) \longrightarrow V(x) \, \psi(x)$$

damit ergibt sich allg. Schrödinger-Gl. eines Teilchens zu

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} \right) |\psi(t)\rangle$$

d.h. im Ortsdarstellung:

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x,t)}$$

"eigentliche" Schrödinger-Gl (1D-Version),
E. Schrödinger 1926

die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$E|\varphi_E\rangle = \hat{H}\,|\varphi_E\rangle$$

lautet in Ortsdarstellung

$$\boxed{E\,\varphi_E(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\varphi_E(x)}$$

DGL 2. Ordnung,

normierbare Lösungen bestimmen Eigenenergien E und Energieeigenfunktionen $\varphi_E(x)$ eines 1D-Teilchens im Potenzial $V(x)$