

Wiederholung:

Impulseigenzustand $|x_k\rangle$ zum Imp. $p = \hbar k$

$$\hat{p} |x_k\rangle = \hbar k |x_k\rangle$$

Wellenfkt.:

$$x_k(x) = e^{i k x} \quad (= \langle e_x | x_k \rangle)$$

Orthogonalität:

$$\langle x_k | x_{k'} \rangle = 2\pi \delta(k - k')$$

Vollständigkeit:

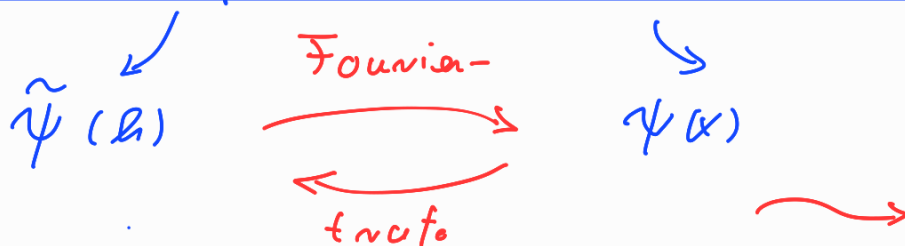
$$\int \frac{dk}{2\pi} |x_k\rangle \langle x_k| = \mathbb{1}$$

Impulswellenfkt. eines Zustandes $|\psi\rangle$:

$$\tilde{\psi}(k) = \langle x_k | \psi \rangle$$

$$\leadsto |\psi\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) |x_k\rangle$$

Wechsel von Impuls- zur Ortsbasis:



$$\text{d.h.} \quad \tilde{\psi}(k) = \int dx \, \psi(x) e^{-ikx}$$

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{+ikx}$$

Verallgemeinerung 1D $\rightarrow$ 3D :

$$x \rightarrow \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad p \rightarrow \vec{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}, \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{pmatrix}$$

2> Ortszustand : $|\varphi_{\vec{x}}\rangle, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^3$

= simultaner Eigenzustand von $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$:

$$\hat{x}_i |\varphi_{\vec{x}}\rangle = x_i |\varphi_{\vec{x}}\rangle$$

$\downarrow$
 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$

Orthogonalität

$$\langle \varphi_{\vec{x}} | \varphi_{\vec{x}'} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$(\equiv \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \delta(x_3 - x'_3))$$

Vollständigkeit

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} |\varphi_{\vec{x}}\rangle \langle \varphi_{\vec{x}}| = \mathbb{1}_{3D}$$

→ Wellenfunktion des Zustand $|\psi\rangle$:

$$\psi(\vec{x}) = \langle \varphi_{\vec{x}} | \psi \rangle$$

$$\rightarrow |\psi\rangle = \int d^3\vec{x} \psi(\vec{x}) |\varphi_{\vec{x}}\rangle$$

Impuls eigenzustand $|\chi_{\vec{h}}\rangle$

= simultane Eigenzustand von $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3$:

$$p_i |\chi_{\vec{h}}\rangle = \hbar h_i |\chi_{\vec{h}}\rangle$$

Wellenfkt.:

$$\chi_{\vec{h}}(\vec{x}) = e^{i \vec{h} \cdot \vec{x}}$$

Orthogonalität:

$$\langle \chi_{\vec{h}} | \chi_{\vec{h}'} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{h} - \vec{h}')$$

Vollständigkeit:

$$\int \frac{d^3\vec{h}}{(2\pi)^3} |\chi_{\vec{h}}\rangle \langle \chi_{\vec{h}}| = \mathbb{1}_{3D}$$

Impuls wellenfkt. eines Zust. $|\psi\rangle$

$$\tilde{\psi}(\vec{h}) = \langle \chi_{\vec{h}} | \psi \rangle$$

→

Basiswechsel

$$\tilde{\psi}(\vec{h}) \xleftrightarrow[30 \text{ F.T.}]{\quad} \psi(\vec{x})$$

d.h.:

$$\tilde{\psi}(\vec{h}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \, \psi(\vec{x}) e^{-i\vec{h} \cdot \vec{x}}$$

$$\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{h}}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{h}) e^{+i\vec{h} \cdot \vec{x}}$$

Impulsoperator in Ortsdarstellung:

$$\psi(\vec{x}) \xrightarrow{\hat{p}_e} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_e} \psi(\vec{x}) \quad \vec{\nabla}$$

$$\text{d.h.} \quad \hat{p}_e \hat{=} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_e}, \quad \hat{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \hat{p}_3 \end{pmatrix} = -i\hbar \text{grad} \quad \parallel$$

$$\begin{aligned} \leadsto \hat{p}^2 &= p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \\ &= (-i\hbar \vec{\nabla})^2 = -\hbar^2 \Delta \end{aligned}$$

$$\vec{\nabla}^2 = \Delta = \underline{\text{Laplaceoperator}} =$$

Schwingungsgleichung eines Punktteilchens

$$\hookrightarrow \text{Dynamik: } i\hbar |\dot{\psi}\rangle = H |\psi\rangle !$$

$\hookrightarrow \psi(\vec{x})$

Hamiltonop. $H = ?$

zuerst: freies Teilchen der Masse m :

2. Anforderungen an H :

- 1) Impulserhaltung! (Energieerhaltung)
- 2) Energie-Impuls-Relation:

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

$\hookrightarrow$ $H := \frac{p^2}{2m}$ auf (1) und 2)!

$$\therefore [H, P] = \left[\frac{p^2}{2m}, P \right] = \frac{1}{2m} [p^2, P] = 0$$

$\leadsto 1)$

$$\bullet \langle H \rangle_{|\psi\rangle} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_{|\psi\rangle} \leadsto 2) \quad \checkmark$$

2. Schwingung des frei. Teilchens:

$$i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 |\psi(t)\rangle \quad | \langle \varphi_{\vec{x}} |$$

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \dot{\psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \quad (1D) \\ i\hbar \dot{\psi}(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x},t) \end{array} \right.$$

2. allg. Fall: Potenzial. $U(\vec{x})$
funktion
($U: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$
 $\vec{x} \mapsto U(\vec{x})$)

2. potenzielle Energie $E_{\text{pot}} = U(\vec{x})$

$$2. \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(\hat{x})$$

2.

$$i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(\hat{x}) \right) |\psi(t)\rangle$$

2. $\langle \varphi_{\vec{x}} | :$

→

2

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t)$$

↑

E. Schrödinger 1926

linear, partielle DGL in (1+3) Dimensionen

Lösen mittels Standardmethode:

(I) bestimme Energieeigenzust. $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots$

zu Eigenenergien (Energieeigenwerte) $E_0, E_1, \dots$

überhand Eigenwertgleichung:

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

in Ortsdarstellung: normierte (*)

bestimme Energieeigenfunktionen $\psi_0(\vec{x}), \psi_1(\vec{x}), \dots$

zu Energieeigenwerten $E_0, E_1, \dots$, überhand

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{x}) \right) \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x})$$

Eigenwertgl. in Ortsdarst. = stat. Schrödingergl.

(II) Darstellung von $|\psi(0)\rangle$ in Energiebasis:

d.h.

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad \xrightarrow{t} |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\omega_n t} |\psi_n\rangle$$

$$\omega_n = \underline{\underline{E_n / \hbar}}$$

in Ortsdarstellung:

$$\psi(\vec{x}, 0) = \sum_n c_n \underbrace{\psi_n(\vec{x})}_{\langle \psi_n | \psi \rangle} \quad \xrightarrow{t} \psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-i\omega_n t} \underbrace{\psi_n(\vec{x})}_{\underline{\underline{\psi_n(\vec{x})}}}$$

Normierung:

$$\begin{aligned} \text{d.h. } |\psi\rangle^2 &= 1 = \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \int d\vec{x} |\psi(\vec{x})|^2 \end{aligned}$$

$$\leadsto \text{insb. } |\psi(\vec{x})| \rightarrow 0$$

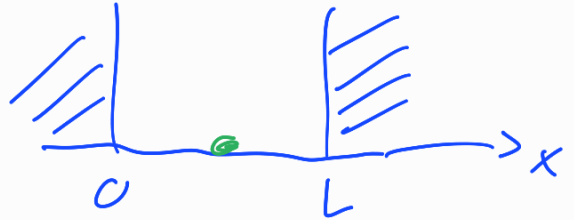
$$\text{für } |\vec{x}| \rightarrow \infty$$



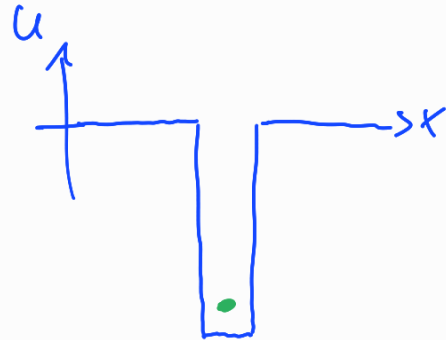
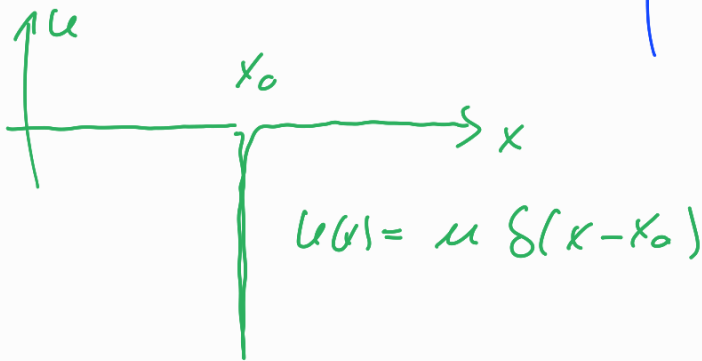
Modellsysteme

1) freies Teilchen

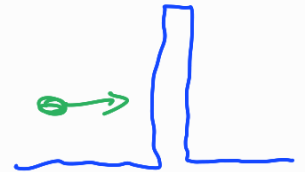
2) Teilchen im Kasten



3) Teilchen im δ -Potential

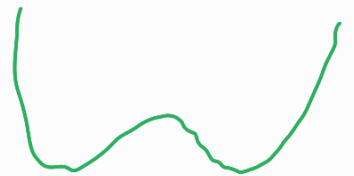
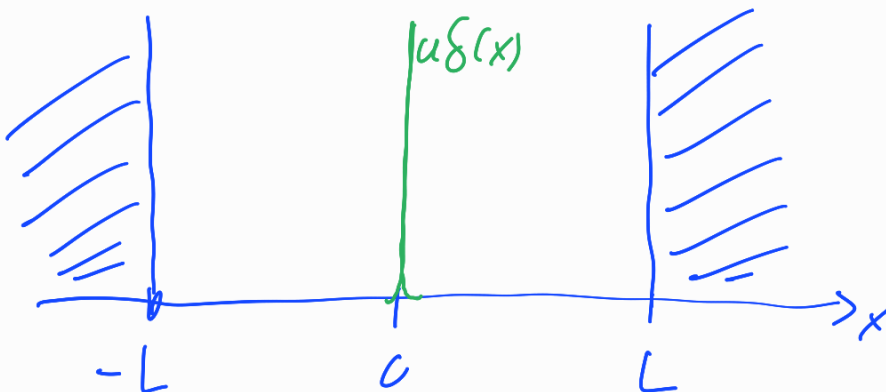


4) Streuung an Potentialbarriere:



→ Tunnel Effekt

5) Teilchen im "Doppeltkasten"



6) Harmonische Oszillator

$$u(x) = \frac{D}{2} x^2$$

((7) Wasserstoffatom

$$u(\vec{r}) = - \frac{\gamma}{|\vec{r}|} \quad))$$

1) Freies Teilchen: $H = \frac{1}{2m} p^2$ (1D)

→ Impulseigenzustand $|x_0\rangle$ zugleich

Energieeigenzustand zur Energie $E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\Gamma \quad H|x_0\rangle = \frac{1}{2m} p^2 |x_0\rangle = \frac{1}{2m} (\hbar k)^2 |x_0\rangle \quad \checkmark$$

2) Energiedarstellung = Impulsdarstellung!

$$|\psi(0)\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) |x_0\rangle$$

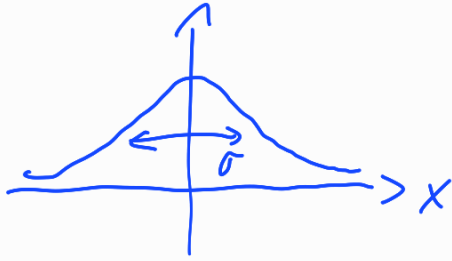
$$\xrightarrow{t} |\psi(t)\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t} |x_0\rangle$$

im Ortsdarstellung:

$$\psi(x, 0) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{ikx}$$

$$\xrightarrow{t} \psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t} e^{ikx}$$

Beispiel: $|\psi(0)\rangle$ mit $\psi(x,0) = e^{-x^2/4\sigma^2}$



$\xrightarrow{t}$? $\uparrow \psi(x,t)$

$$\psi(x,0) \xrightarrow{\mathcal{F}, \mathcal{I}} \tilde{\psi}(k) = \tilde{\tau} e^{-\sigma^2 k^2}$$

|
Reib. & Unlsg.

$$\downarrow t$$

$$\psi(x,t) = \tilde{\tau} \int \frac{dk}{2\pi} \underbrace{e^{-\sigma^2 k^2} e^{-iE_k t/\hbar} e^{ikx}}$$

$$\left(E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad \exp\left(-\sigma^2 \underline{k^2} - i \frac{\hbar t}{2m} \underline{k^2} + i \underline{kx} \right)$$

$$= \tilde{\tau} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-a k^2 + i k x}$$

$$a = \sigma^2 + i \frac{\hbar t}{2m}$$

$$\uparrow \sqrt{\frac{\pi}{|a|}} \tilde{\tau} e^{-\frac{x^2}{4|a|}}$$

Grupp!

