

2) Schrödingergleichung

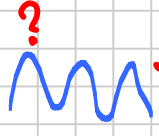
2.1 Bedingungen:

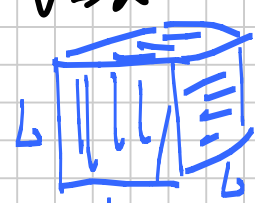
- (a) $\psi(\vec{r}, t)$ hängt nur von der Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, 0)$ ab (Anfangsbedingung) $\Rightarrow$ Differentialgl. II. Ordnung in t
- (b) Superpositionsprinzip für $\psi \Rightarrow$ Df. Glu. ist linear in ψ
- (c) $\psi \in L^2$ für $\forall t \Rightarrow$ Df. Glu. ist homogen (ψ bleibt normierbar für alle t)
- (d) Für ein freies Teilchen sollte die ebene Welle eine Lösung sein:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E_{\vec{p}} t)\right]$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (*)$$

Durch Einsetzen: $E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

OK  Normierung von ebenen Wellen: $\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E t)}$
 $\rightarrow |\psi| = |A| \Rightarrow \text{const} \rightarrow \int_V d^3r |\psi|^2 \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \infty$

$\rightarrow$ Periodisch (Randbedingungen)  $L^3 = V$

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x+L, y, z, t) = \psi(x, y+L, z, t) = \psi(x, y, z+L, t)$$

Bedingung: $(p_x, p_y, p_z) = \frac{2\pi\hbar}{L} (n_x, n_y, n_z)$

$\begin{array}{c} 0 \quad K_x \quad 2\pi \\ \hline 0 \quad p_x \quad 2\pi\hbar \end{array}$

mit $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

für die Normierung von ψ : $A = \frac{1}{\sqrt{V}}$, mit $V = L^3$

2.2 Wellenpaket

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\vec{p}, 0) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E_{\vec{p}} t)} \equiv \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

FT!

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) := \tilde{\psi}(\vec{p}, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\vec{p}} t}$$

- Wellenfunktion im Impulsraum

$$\int d^3 r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2$$

Parseval'sches Theorem FT

$$|\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

ist die Wahrsch. das Teilchen
zum Zeitpunkt t innerhalb
des Impulsraums $d^3 p / (2\pi\hbar)^3$
um den Impuls $\vec{p}$ vorzufinden

Erwartungswerte:

Position: $\langle \vec{r} \rangle = \int d^3 r \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2$

Impuls: $\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2$

Impuls im Ortsraum:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) =$$

$$= \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\vec{p}_1, t) \tilde{\psi}(\vec{p}_2, t) \underbrace{\int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_2 \cdot \vec{r}}}_{\vec{p}_2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)} =$$

$\delta(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)!$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2$$

→ Impuls

$$\vec{p} \longleftrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

und

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 r \psi^* \vec{p} \psi$$

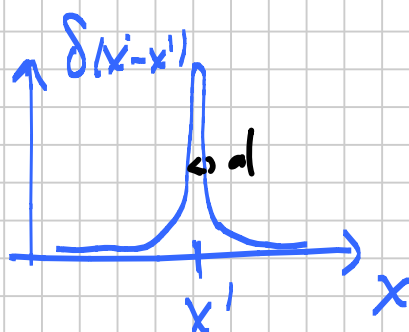
Ort:

$$\vec{r} \longleftrightarrow i\hbar \vec{\nabla}_p$$

Dirac (1926)

δ -Distribution

$$\delta(x-x') = \lim_{d \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}d} e^{-\frac{(x-x')^2}{2d^2}}$$



Eigenschaften:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \delta(x-x') = f(x), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') = 1$$

FT:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar \delta(p-p'), \quad \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} = \delta(x-x')$$

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left| \frac{dg}{dx} \right|_{x=x_i}}$$

wobei: $g(x_i) = 0$
einfache Nullstellen

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

3d: $\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z')$

Erwartungswert $\langle E \rangle$: $H(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\vec{p}^2}{2m} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2 = \\
 &= \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \right) \psi(\vec{r}, t) \\
 &\stackrel{v}{=} \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \\
 &= \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\vec{p}_1, 0) \tilde{\psi}(\vec{p}_2, 0) \underbrace{\int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 \vec{r} - E_{p_1} t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2 \vec{r} - E_{p_2} t)}}_{E_{\vec{p}_2} (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)} = \\
 &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} E_{\vec{p}} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2
 \end{aligned}$$

$\rightarrow E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Die Wellengleichung (*):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\right) \psi(\vec{r}, t)$$

mit $H(\vec{p}) \leftrightarrow \hat{H}\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\right)$ - Operator

Damit beschreibt die Hamiltonfunktion die Evolution der Wellenfunktion in der Zeit.

2.3. Operatoren in QM

Def: Ein Operator $\hat{A}$ ist definiert durch eine Vorschrift, so daß für $\psi(\vec{r}) \in L^2$

$$\hat{A} \psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \in L^2$$

$$\hat{A} \cdot \hat{B} \psi = \hat{A}(\hat{B} \psi), \quad (\hat{A} + \hat{B}) \psi = \hat{A} \psi + \hat{B} \psi$$

Einheits. $\hat{1} \psi = \psi \rightarrow \hat{1} \cdot \hat{A} = \hat{A}$

Null $\hat{0} \psi = 0 \rightarrow \hat{0} \cdot \hat{A} = \hat{0}$

$\exists \hat{A}^{-1}: \hat{A}^{-1} \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{1} \rightarrow A \psi = \varphi \leftrightarrow \hat{A}^{-1} \varphi = \psi$

Def: $\hat{A}$ heißt **linearer** Operator, wenn mit $\hat{A} \psi_1 = \varphi_1$ und $\hat{A} \psi_2 = \varphi_2$

gilt: $\hat{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$ (c_1, c_2 - kompl. konst.)

Def: **Kommutator** $[\hat{A}, \hat{B}]$: $\hat{A}, \hat{B}$ seien Operatoren ($\begin{smallmatrix} A & B \\ B & A \end{smallmatrix} \neq$) dann ist der Kommutator durch

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \quad \text{definiert.}$$

Beispiel:

$$[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}] \psi = (x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i) \psi =$$

$$= \cancel{x_i \frac{\partial \psi}{\partial x_j}} - \delta_{ij} \psi - \cancel{x_i \frac{\partial \psi}{\partial x_j}} = -\delta_{ij} \psi \quad \text{mit } \frac{\partial}{\partial x_j} (x_i \psi)$$

$$[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}] = -\delta_{ij}$$

Def. Skalarprodukt (φ, ψ)

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

Eigenschaften: $(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi)$

linear im 2. Faktor: $(\varphi, c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 (\varphi, \psi_1) + c_2 (\varphi, \psi_2)$

antilinear im 1. Faktor: $(c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2, \psi) = c_1^* (\varphi_1, \psi) + c_2^* (\varphi_2, \psi)$

$$(\varphi, \varphi) \geq 0, \text{ und somit } (\varphi, \varphi) = 0 \Leftrightarrow \varphi = 0$$

Def: Operatoren im Skalarprodukt:

$$(\varphi, \hat{A} \psi) = \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r})$$

Def: $\hat{A}^\dagger$ heißt "zu $\hat{A}$ adjungierter Operator",
wenn gilt: $(\forall \varphi, \psi \in L)$

$$(\hat{A}^\dagger \varphi, \psi) = (\varphi, \hat{A} \psi), \text{ d.h. } \int d^3r (\hat{A}^\dagger \varphi)^* \psi = \int d^3r \varphi^* \hat{A} \psi$$

Def: Der Operator $\hat{A}$ heißt **hermitisch** wenn $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

Eigenschaften:

$$(\hat{A}, \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger, \quad (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

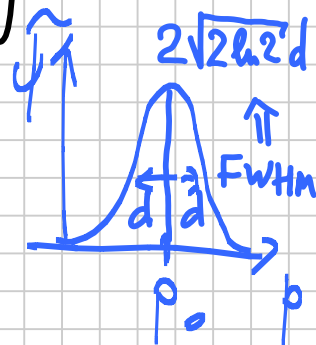
$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger]$$

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad \text{die Baker-Hausdorff Identität}$$

$$e^{\hat{A}} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

2.4 Gauß'sches Wellenpaket (1d)

$$\tilde{\psi}(p, \hbar) = A \exp\left[-(p-p_0)^2 d^2 / \hbar^2\right]$$



$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)} \\ &= \frac{A}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\underbrace{a(p-\frac{b}{a})^2 + \frac{b^2}{a} - c}_{-ap^2 + 2bp - c}} = \frac{A}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{a} - c} \end{aligned}$$

mit $a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar}$, $b = \frac{d^2 p_0}{\hbar^2} + i \frac{x}{2\hbar}$, $c = \frac{d^2 p_0^2}{\hbar^2}$

Gauß: $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

Wahrscheinlichkeitsdichte: $2 \operatorname{Re}\left(\frac{b^2}{a} - c\right)$

$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{a} e^{2 \operatorname{Re}\left(\frac{b^2}{a} - c\right)}$$

($\psi = e^{\Delta} \rightarrow |\psi|^2 = \psi^* \psi = e^{\Delta^* + \Delta} = e^{2 \operatorname{Re} \Delta}$)

Der Exponent wird

$$2 \operatorname{Re}\left(\frac{b^2}{a} - c\right) = 2 \operatorname{Re} \frac{(b^2 - ac)a^*}{a a^*} = - \frac{x - v_0 t}{2 d^2 (1 + \Delta^2)}$$

mit $v_0 = \frac{p_0}{m}$ und $\Delta = \frac{t\hbar}{2md^2}$

Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1 \rightarrow A = \sqrt[4]{8\pi d^2}$

Gauß'sches Wellenpaket

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} \exp\left[-\frac{(x-v_0 t)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}\right]$$

Mittlere Position

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - v_0 t) |\psi|^2 + \int_{-\infty}^{\infty} dx v_0 t |\psi|^2 = v_0 t$$

Mittlerer Impuls:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} p |\tilde{\psi}(p,t)|^2 = p_0 \leftarrow v_0 = \frac{\partial E_p}{\partial p} \Big|_0 = \frac{p_0}{m}$$

ein klassisches Teilchen mit Gruppen-Geschwindigkeit:

Mittlere Abweichungen

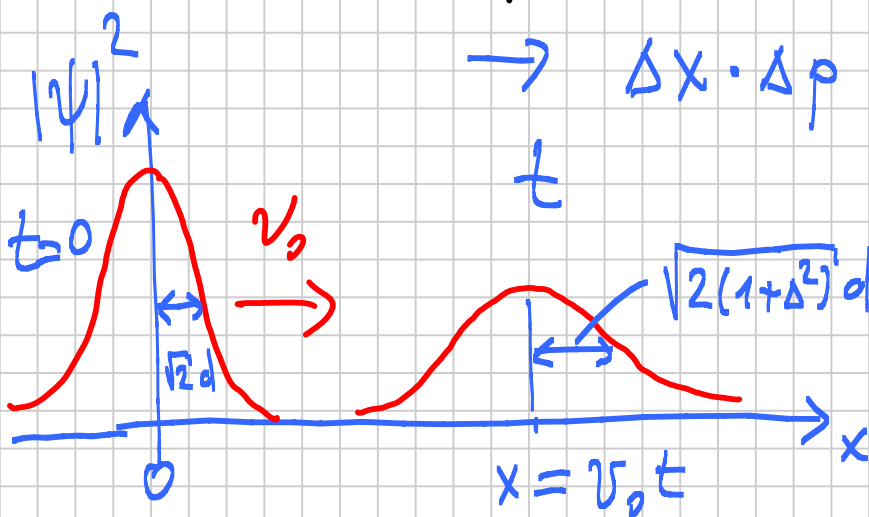
$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - v_0 t)^2 |\psi(x,t)|^2 = d^2 (1 + \Delta^2)$$

(nutzen: $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\pi}/2\alpha^{3/2}$)

$$\langle \Delta p^2 \rangle = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2d}\right)^2$$

$$\rightarrow \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \Delta^2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Spezialfall der Unschärfe-Relation



Die zeitliche Entwicklung eines Gauß'schen Wellenpakets

2.5 Verallgemeinerte Schrödinger-Gleichung.

Korrespondenzprinzip:

	Klassische Variablen	QM-Operatoren	
Ort	$\vec{r}$	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$	} wirken auf ψ
Impuls	$\vec{p}$	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$	
Energie	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$	

Wellengleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Hamiltonfunktion $\rightarrow \hat{H}$ (Hamiltonoperator)

a) Teilchen im Potential $V(\vec{r})$

($\vec{\nabla}^2 = \Delta$)

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

E. Schrödinger
1925

b) geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) - q \left(\phi - \frac{\dot{\vec{r}}}{c} \vec{A} \right)$$

$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$
 $\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$

$\cdot \equiv \frac{d}{dt}$

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right)$$

$$H(\vec{p}, \vec{r}, t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$$

Verallgemeinerter Impuls:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m \dot{\vec{r}} + \frac{q}{c} \vec{A} \Rightarrow \dot{\vec{r}} = \frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)$$

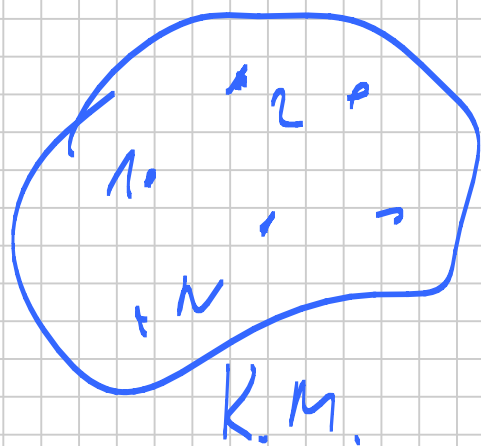
$$H(\vec{p}, \vec{q}, t) = m \dot{\vec{r}}^2 + \cancel{\frac{q}{c} \vec{r} \cdot \vec{A}} - \frac{m \dot{\vec{r}}^2}{2} + q\phi - \cancel{q \frac{\vec{r}}{c} \cdot \vec{A}} = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} + q\phi$$

$\frac{m \dot{\vec{r}}^2}{2} = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + q\phi(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

EM-Feld: $\vec{p} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)$
 $(\phi, \vec{A}) \quad V \rightarrow q\phi \quad \Rightarrow \hat{H} = \frac{\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}}{2m} + q\phi$

c) N-Teilchen System



$\Rightarrow$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$$

$$\hat{H}(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

QM

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \hat{H}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$$

$\rightarrow$ Komplex!

2.6 Postulate der Quantenmechanik (Ortsraum)

P1

Der Zustand $\leftrightarrow \psi(\vec{r}, t)$

Wahrsch. Dichte $\leftrightarrow |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^D$

D - die Dimension

P2

Observablen $\leftrightarrow$ Operatoren: $\hat{A}$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^D r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t)$$

- Erwartungswert

P3

Die zeitliche Evolution der Wellenfunktion $\leftrightarrow$
 $\rightarrow$ die Schrödinger-Gleichung (56)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad \text{- der Hamilton-Operator (1-Teilchen)}$$

2.7 Das Ehrenfest'sche Theorem

$$\text{SG: } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad \rightarrow \quad \dot{\psi} = -\frac{i}{\hbar} H\psi$$

$$\text{Konjug. SG: } -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H^\dagger \psi^* = H\psi^* \quad \rightarrow \quad \dot{\psi}^* = \frac{i}{\hbar} H\psi^*$$

$$H^\dagger = H \quad \text{Hermitizität von } H: (H^\dagger \psi, \psi) = (\psi, H\psi)$$

a) Unter der Voraussetzung, dass ψ und $\psi^* \xrightarrow{|\vec{r}| \rightarrow \infty} 0$

$$\int d^3r \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \right) \psi = \int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi \right)^* \psi$$

- zweimalige partielle Integration

$$b) V = V(\vec{r}) \rightarrow \int d^3r \underbrace{\psi^*}_{\text{real}} V \psi = \int d^3r (V\psi)^* \psi$$

Erwartungswert: $\hat{A}$ -linear

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \left(\underbrace{\dot{\psi}^*}_{-\frac{i}{\hbar} H\psi^*} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \underbrace{\dot{\psi}}_{-\frac{i}{\hbar} \hat{A} H\psi} \right)$$

$H^\dagger = H$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad \text{Ehrenfest'sche Gleichung}$$

18

Vergleich mit der klassischen Mechanik: $A(p, q, t)$

$$\frac{d}{dt} A(p, q, t) = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i \right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \text{Ham. Gl.}$$

def: $\{H, A\} = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right)$ Poisson-Klammer

$$\frac{d}{dt} A(p, q, t) = \{H, A\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

$$\rightarrow \underbrace{\{H, A\}}_{\text{K.M.}} \rightarrow \underbrace{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]}_{\text{QM}}$$

2.8 Kontinuitätsgleichung - $|\psi|^2$

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^* \psi$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} = \frac{1}{-i\hbar} (\hat{H} \psi^*) \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* (\hat{H} \psi)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \rightarrow \text{die Terme mit } V(\vec{r}) \text{ fallen weg}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[(\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi) \right]$$

def: Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{Kontinuitäts Gl. QM.}$$

Integral Form (Gauß)

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3r \rho(\vec{r}, t) = - \int_S d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \xrightarrow[\substack{r \rightarrow \infty \\ S \rightarrow \infty}]{} 0$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\vec{j}| < \frac{1}{r^3}$$

$$\frac{d}{dt} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) = \frac{d}{dt} \int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 0$$

$\rightarrow$ Normierung von ψ auf 1 - $(\forall t)$!

2.9 Stationäre Lösung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

$\hat{H}$ - zeitunabhängig!

$$\rightarrow \text{Separation: } \psi(\vec{r}, t) = f(t) \psi(\vec{r})$$

SG:
$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \hat{H} \psi(\vec{r})$$

$f(t)\psi(\vec{r}) \neq 0$ $E \Leftarrow \text{const} \Rightarrow E$

Linke Seite $\rightarrow$ nur $t \Leftrightarrow$ rechte Seite $\rightarrow$ nur vor $\vec{r}$

Dann:

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} &= E f(t) \\ \hat{H} \psi(\vec{r}) &= E \psi(\vec{r}) \end{aligned}}$$

mit Lösung: $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$

zeitunabhängige SG

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\vec{r})$$
 - stationäre Zustände

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$$

$$\int d^3r |\psi(\vec{r})|^2 < \infty$$
 - Normierung von $\psi \rightarrow E$

2.10 Eigenwertgleichung

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

ψ - Eigenfunktion zum Operator $\hat{H}$
 E - Eigenwert

Theorem-1: Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell

$$(\psi, \hat{H} \psi) = (\psi, E \psi) = E (\psi, \psi)$$

$$(\hat{H} \psi, \psi) = (E \psi, \psi) = E^* (\psi, \psi)$$

$$\rightarrow 0 = (E - E^*) (\psi, \psi) \rightarrow E^* = E$$

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

Theorem-2: Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

Beweis: $\psi_m \neq \psi_n \mid \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \hat{H}\psi_m = E_m\psi_m$
 $E_n \neq E_m$

$$E_n(\psi_m, \psi_n) = (\psi_m, \hat{H}\psi_n) \stackrel{H^\dagger=H}{=} (\hat{H}\psi_m, \psi_n) = E_m(\psi_m, \psi_n)$$

$E_n \neq E_m$

$$\Rightarrow 0 = (E_n - E_m)(\psi_m, \psi_n) \Rightarrow (\psi_m, \psi_n) = 0$$

$\neq 0$

Entartung: Wenn zu einem Eigenwert (E_n) - mehrere Eigenfunktionen ($\psi_n^1, \psi_n^2, \dots$) existieren

$\Rightarrow$ kann man ψ_n^i - orthogonalisieren! (Schmidt-Verf.)

$\psi_n \rightarrow$ VONS: $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{nm}$ - Orthogonalität

$$\sum_n \psi_n^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') - \text{Vollständigkeit}$$

Darstellung eines allgemeinen Zustandes $\forall \psi$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \int d\vec{r}' \underbrace{\psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}')}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \psi(\vec{r}') = \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad c_n = (\psi_n, \psi)}$$

Normierung: $\sum_n |c_n|^2 = 1$

2.11 Entwicklung nach stationären Zuständen

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n \quad \text{und} \quad \psi_n(\vec{r}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r})$$

$\forall \psi(\vec{r}, t)$, zur Zeit $t=0$: $\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r})$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r})} \quad c_n = (\psi_n, \psi(t=0))$$

- ist die Lösung der zeitabhängigen SG!

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_n E_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r}) = \\ &= \hat{H} \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r}) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

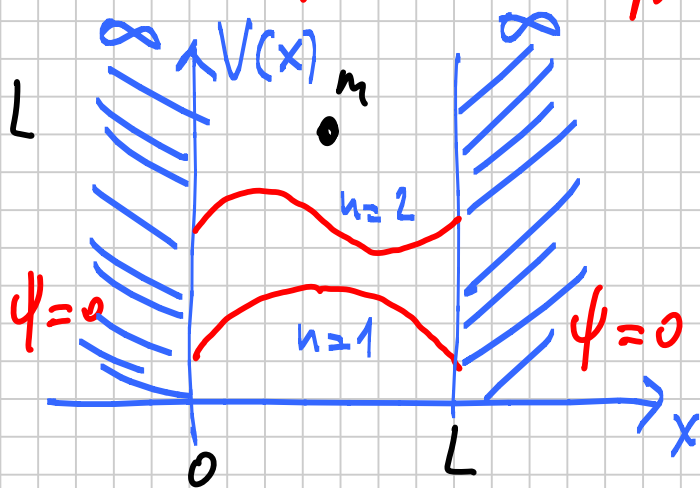
2.12 Einfaches Beispiel: Unendlich tiefer Potentialtopf

(1d)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$



R.B: $\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0 \Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right), n=1, 2, \dots$

$$0 \leq x \leq L \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} = E_n \psi_n \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m L^2} \Rightarrow E_n^{\text{min}} \neq 0 \quad n=1$$