Integrierter Kurs IV

Theoretische Physik II
Tom Folgmann

3. Mai 2023

1 Einleitung und Wellenfunktion

Einleitung

VL 1
25.04.2023,
08:15

Bei der Auffassung kleinster Teilchen gab es Probleme mit dem Teilchenmodell.

. . . .

□ Stelle dieses Problem *deutlich* dar. Skizziere eine Lösung desselben. (✎1)

. . . .

Schwarzkörperstrahlung

Jede sogenannte *Mode* mit der Frequenz $\nu = c_0/\lambda$ des elektromagnetischen Feldes kann beliebige Energien enthalten, enthält jedoch nach dem *Äquipositionsprinzip* im Mittel die Energie $E = k_B \cdot T$, bekannt als das *Rayleigh-Jeans-Gesetz*.

Photoeffekt

Compton Effekt

[→ IK4 Exp. II]

Welleneigenschaften der Materie

[→ IK4 Exp. II]

Doppelspaltexperiment mit Elektronen

[→ IK4 Exp. II]

. . . .

□ Lies im Skript der *Experimentalphysik II* die Inhalte der Überschriften nach. (✎2)

→ Was ist die Wellenfunktion beim Doppelspaltexperiment? Wie erklärt man, daß ein Elektron durch beide Spalten gehen kann? Was passiert mit einem einzeln eingestrahlten Elektron? (✎2.1)

→ Wie lautet die *de Broglie Relation*? (✎2.2)

(✎2.3) → Kann man das Doppelspaltexperiment auch mit massiveren Teilchen oder Molekülen durchführen? Gibt es hierbei eine Grenze? Recherchiere den Beitrag zur Doppelspaltuntersuchung der *Universität Konstanz*.

....

Welle-Teilchen-Dualismus

Wir haben beobachtet:

- → elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen
- → materielle Teilchen verhalten sich wie Wellen

Als Ziel unserer folgenden Untersuchungen setzen wir eine *einheitliche Theorie*, welche sowohl die Wellen- als auch die Teilcheneigenschaften beschreibt.

Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Wir wollen den folgenden Zusammenhang herstellen:

freies *Teilchen*	ebene *Welle*
Impuls $p \in \mathbb{R}^3$	Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$
Energie $E(p) = p^2/2m$	Kreisfrequenz $\omega(k) = \hbar k^2/2m = c_0 \cdot \|\|k\|\|_2$
	Amplidute am Ort $r(t)$ mit $\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\Big(\mathring{i}(\langle r(t), k\rangle - \omega \cdot t)\Big)$ → *Wellenfunktion*

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Teilchen- und Welleneigenschaften.

Es kommen nun die folgenden Fragen auf:

- → Wie hängen p und k zusammen?
- → Was ist die physikalische Bedeutung von $\psi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3, \mathbb{R})$?

Es stellt sich heraus, daß wir die erste Frage bereits mit der *de Broglie Relation* [→ IK4 Exp II] beantworten können: $p(k) = \hbar \cdot k$, wobei $\hbar := h/(2\pi)$ mit $h = 6.6 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$. Für die Energie finden wir aus der Schwarzkörperstrahlung den Zusammenhang $E(\omega) = \hbar \cdot \omega$ (Einstein/Planck) mit $\omega = 2\pi \cdot \nu$. In die Funktion ψ eingesetzt folgt

$$\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\left(\frac{\mathring{i} \cdot (\langle p, r(t), -\rangle\, E(p) \cdot t)}{\hbar}\right).$$

Für die Dispersion der Welle gilt

$$E(\omega) = \hbar \cdot \omega = \begin{cases} \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} & m > 0 \\ \hbar \cdot c_0 \cdot ||k||_2 & \text{sonst} \end{cases} = \begin{cases} \frac{\langle p, p\rangle}{2 \cdot m} & m > 0 \\ c_0 \cdot ||p||_2 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die physikalische Interpretation müssen wir uns der Wahrscheinlichkeitsinterpretation widmen:

Teilchen	Welle
Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (pro Volumen) am Ort $r(t)$ zur Zeit $t \in \mathbb{R}$	Intensität der Welle $\lvert\psi(t, r(t))\rvert^2$

Prinzipiell ist es möglich, den *Ort* zum *Zeitpunkt* eines Teilchens zu kennen; anders ist es bei quantenmechanischen Wellen. Wir bemerken:

→ ψ bezeichnet man auch als *Wahrscheinlichkeitsamplitude*.

→ Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des durch r beschriebenen Teilchens ist gegeben als Integral
$$P(t, V) := \int \lvert\psi(t, x)\rvert^2 \, \lambda_V(dx) =: \mu(V)$$
mit Wahrscheinlichkeitsmaß $P(t, \cdot) =: \mu$ auf $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3))$. Ist der Aufenthalt in einem Volumen $V \subseteq \mathbb{R}^3$ bekannt, so sei
$$P(t, V) := \begin{cases} \int \lvert\psi(t, x)\rvert^2 \, \lambda_V(dx) & V \in \sigma(\mathbb{R}^3) \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$
eine Umdefinition des Maßes.

→ Aus der Wahrscheinlichkeitsmaß-Eigenschaft $\mu(\mathbb{R}^3) = 1$ folgt
$$P(t, \mathbb{R}^3) = \int \lvert\psi(t, x)\rvert^2 \, \lambda_V(dx) = 1.$$

→ In einem Volumen $W \subseteq V \subseteq \mathbb{R}^3$ gilt $\mu|_V(W) = \lambda(V) \cdot \lvert C\rvert^2$ und für $W = V$ folgt $\lvert C\rvert^2 = 1/\lambda(V)$.

Ebene Wellen beschreiben also Teilchen mit wohldefiniertem Impuls $p = \hbar \cdot k$, aber vollständig unbestimmtem Ort.

. . . .

□ Überlege dir den Spezialfall eines Punktes $\{x\} \subseteq \mathbb{R}^3$ als Testvolumen. Wie sieht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus? (✎3)

. . . .

Wellenpakete

Als nächstes beschäftigen wir uns mit der Frage, wie wir Teilchen mit genau definiertem Aufenthaltsort beschreiben. Wir wenden uns hierbei an das Prinzip der *Superposition*, konkreter der *Fourier-Summation*, bei der wir eine Funktion $f \in \mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3)$ zerlegen in Funktionen des Typus der ebenen Welle:

$$\psi(t, r(t)) = \frac{1}{(2 \cdot \pi)^3} \int \left(\exp\left(\mathring{\imath} \cdot (\langle x, r(t) \rangle - \frac{\hbar \cdot x^2}{2 \cdot m} \cdot t) \right) \right)_{x \in \mathbb{R}^3} \left(\mathbb{1}_V \cdot \tilde{\psi} \right) \quad V \subseteq \mathbb{R}^3,$$

wobei $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3), \tilde{\psi})$ ein Maßraum ist. Wir haben dabei den Zusammenhang

$$E = \hbar \cdot \omega(k) = \frac{\hbar \cdot k^2}{2 \cdot m}.$$

(✎4) □ Warum wird bei der Fourier-Summation keine Wurzel im Vorfaktor gezogen? Recherchiere verschiedene Konventionen. [*Tipp:* Bedenke $\hbar = h/(2 \cdot \pi)$ und die Definition des Impulses über k.]

VL 2 27.04.2023, 10:00

Gaußsches Wellenpaket

Als fundamentale Funktion eines Wellenpaketes zählt das sogenannte *Gaußsche Wellenpaket*. Es wird beschrieben durch die Funktion

$$\psi(k) = A \cdot \exp\left(\frac{-(k-k_0)^2}{4 \cdot \pi^2}\right), \quad \psi \in \operatorname{Abb}\left(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3\right),$$

wobei $4\pi^2$ mit der „Breite" korreliert und k_0 der *mittlere Wellenvektor* ist. Die Funktion hat die Form

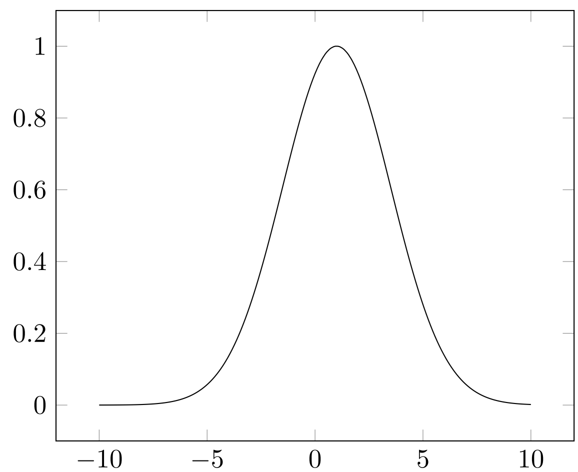

Abbildung 1: Die Gaußkurve für $A = 1$, $k_0 = 1$ in $\mathbb{R}$.

Das Ergebnis der Fourier-Summation angewendet auf die Gaußfunktion ergibt

$$|\psi(t, r(t))|^2 = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot w(t)}^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{(r(t) - v \cdot t)^2}{2 \cdot w(t)^2}\right)$$

mit der Definition $v := \hbar \cdot k/m = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\omega(k_0 + t \cdot h)\right]\big|_{t=0} = d\omega(k_0)(h)$ und $w(t) := \sqrt{w(0)^2 + ((\hbar \cdot t)/(2 \cdot w(0) \cdot m))}$ mit dem Startwert $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$.

(✎5) □ Man spricht bei Fourier-Summationen vom *Raumwechsel*. Was ist damit gemeint? Welche Räume haben wir hier verwendet?

□ Zeichne das Ergebnis einmal graphisch für dieselben Parameter wie oben. Was fällt dir auf? (✎6)

□ Welches $h \in \mathbb{R}^3$ ist bei der Ableitung $d\omega(k_0)(h)$ gemeint? (✎7)

....

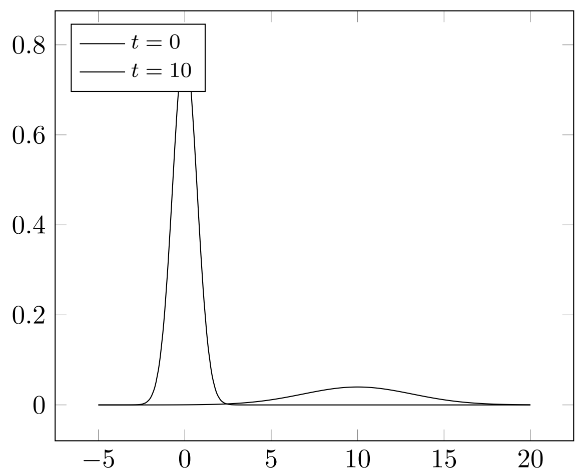

Abbildung 2: Die Forier-Summierte Gaußkurve für $A = 1$, $k_0 = 1$ in $\mathbb{R}$ zum Zeitpunkt $t = 0$ und $t = 10$

Zusammenfassung

→ Das Wellenpaket bewegt sich mit der Aufenthalserwartung

$$\langle r(t) \rangle = \int (r \cdot |\psi(t,r)|)_{r\in\mathbb{R}^3} \, \lambda\,(dr)\,.$$

→ Das Wellenpaket im Ortsraum ist ebenfalls eine Gaußfunktion mit Peakbreite $w(t)$ und Startwert $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$.

→ Das Wellenpaket erfährt Dispersion für $t > 0$ durch die Funktionsdefinition w:

→ Für $t >> w(0)^2 \cdot m/\hbar$ ist $w(t) \approx \hbar \cdot t/(2 \cdot w(0) \cdot m)$ linear von t abhängig. Für lange t ist die Dispersion also linear (und nicht proportional zu $\sqrt{t}$).

→ Für die Mittelung $\langle r(t) \rangle$ folgt

$$\Delta r^2 := \langle r(t_1) - \langle r(t_0) \rangle \rangle = \int ((r - \langle r \rangle) \cdot |\psi(t,r)|)_{r\in\mathbb{R}^3} \, \lambda\,(dr) = w(t)^2.$$

....

□1 Berechne die Integrale $\int x \cdot \exp\big(-x^2\big)\,\lambda\,(dx)$, $\int x \cdot \exp\big(-(x-x_0)^2\big)\,\lambda\,(dx)$ und $\int (x - x_0) \cdot \exp\big(-(x-x_0)^2\big)\,\lambda\,(dx)$ für $x_0 \in \mathbb{R}$ auf $(\mathbb{R}, \sigma(\mathbb{R}), \lambda)$. Wie ist die Struktur? (✎8)

□ Rechne die Dispersion des Wellenpaketes für $t > 0$ gemäß w nach und zeige $w(t)^2 > w(0)$. (✎9)

....

1.1 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Zunächst bemerken wir die Eigenschaft der *Normerhaltung* gemäß des *Satzes von Parseval* der Fourier-Summation. Es gilt

$$\int |\psi(t,r)|^2 \, \lambda(dr) = \int \frac{\left|\tilde{\psi}(k)\right|^2}{(2\cdot\pi)^3} \, \lambda(dk) = \int \frac{\left|\tilde{\psi}(p)\right|^2}{(2\cdot\pi\cdot\hbar)^3} \, \lambda(dp)$$

und für die Mittelung

$$\langle p \rangle = \int \frac{p\cdot\left|\tilde{\psi}(p)\right|^2}{(2\cdot\pi\cdot\hbar)^3} \, \lambda(dp) := \int \frac{p\cdot\exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{4\cdot\hbar^2\cdot\sigma^2}\right)}{(2\cdot\pi\cdot\hbar)^3} \, \lambda(dp) \overset{(.??)}{=} p_0 = \hbar\cdot k_0.$$

Die mittlere Schwankung, also physikalisch die Genauigkeit des Impulses im Impulsraum, ergibt sich zu

$$\Delta p^2 = \langle (p - \langle p \rangle^2)^2 \rangle = \hbar^2 \cdot \sigma^2,$$

wobei unter Verwendung von $\Delta r^2 = w(t)^2$ folgt

$$\Delta r^2 = w(t)^2 \geq \left(\frac{1}{2\cdot\sigma}\right)^2 = \frac{1}{4\cdot\sigma^2},$$

sodaß mit beiden Gleichungen unter Produktbildung und Wurzelzug eine Ausdrucksweise der Unschärferelation, konkret jene von Heisenberg, folgt:

$$\Delta r \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

. . . .

(✎10) ☐ Lässt sich die Wellenfunktion direkt experimentell bestimmen? Recherchiere die *Quanten-Zustands-Tomographie*.

. . . .

Physikalische Bedeutung

Aus der Unschärferelation folgen folgende physikalische Konsequenzen:

→ Unmittelbar ist ablesbar, daß bei genauerer Ortsbestimmung die Impulsgenauigkeit abnimmt.

→ Für $\Delta p \to 0$ (Fall ebene Welle) ist $\Delta r \to \infty$.

→ Der Phasenraum ist infolge der Unschärferelation quantisiert in Einheiten von $\hbar$.

1.2 Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Als Ziel der Untersuchungen ist eine Wellengleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude Ψ zu finden. Wir lassen hierbei den mathematischen Beweis fallen und versuchen, die Gleichung zu „erraten“.Mit unserem Ausdruck der Fouriertransformation $\mathscr{F}$ und dem Diffeomorphismus $p(t) := \hbar\cdot k(t)$ auf $\hat{\psi} := \mathscr{F}\psi$ erhalten wir

$$\psi(t, r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \tilde{\psi}(p) \cdot f(t, r(t)) \, \lambda(dp) = (\mathscr{F}\hat{\psi})(t, r(t)).$$

Die Funktion f war dabei eine Abkürzung einer exp Verkettung, welche wir in zwei Kinderfunktionen aufteilen können:

$$f := \left(\exp\left(\mathring{\imath}\cdot(\langle p, r(t)\rangle - p^2\cdot t/2m)/\hbar\right)\right)_{(t,r)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^d} = f_1(t,r(t))\cdot f_2(t,r(t)).$$

Für die Ableitung gilt dann

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s,r(s))\right]\Big|_{s=t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\mathscr{F}\hat{\psi}(s,r(s))\right]\Big|_{s=t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\left(\frac{-\mathring{\imath}}{2m\hbar}\right)\cdot p^2\cdot f(t,r(t))\,\lambda\,(dp)\,.$$

. . . .

□ Rechne nach, daß es sich bei p um einen Diffeomorphismus zwischen $(\mathbb{R},\tau_{\mathbb{R}})$ und $(\mathbb{R}^3,\tau_{\mathbb{R}^3})$ handelt und der Transformationssatz greifen kann. Welche Annahme musst du dabei machen? (✎11)

□ Wie lautet die Ableitungen $df_1(t,r)(0,h)$ und $df_2(t,r)(0,h)$? Notiere den Ausdruck in verschiedenen Ableitungsdarstellungen. Ersetze $p^2\cdot f_1(t,r(t))$ durch den entsprechenden Ableitungsausdruck. (✎12)

. . . .

Mit der Aufgabe folgt dann

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s,r(s))\right]\Big|_{s=t} = \frac{\mathring{\imath}\cdot\hbar}{2\cdot m}d(\mathscr{F}\tilde{\psi})(t,r(t))(\hbar)(\hbar)$$

mit der Definition

$$\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)}(\mathscr{F}\hat{\psi})(t,r(t)) = \int\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\cdot\hat{\psi}(p)\cdot f(t,r(t))\,\lambda\,(dp)\,.$$

Wir erhalten also die _zeitabhängige Schrödingergleichung für freie Teilchen_ der Form

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s,r(s))\right]\Big|_{s=t} = \frac{\mathring{\imath}\cdot\hbar}{2\cdot m}\cdot\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)}(\mathscr{F}\hat{\psi})(t,r(t)) = \frac{\mathring{\imath}\cdot\hbar}{2\cdot m}\cdot\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)}\psi(t,r(t)).$$

. . . .

□ Berechne die Ableitung $df(t,r(t))(0,h)$. Berechne weiter $d\psi(t,r(t))(1,0)$ und verifiziere dadurch den oberen Funktionsausdruck. (✎13)

□ Klassifiziere die Schrödingergleichung. Welche Ordnung hat sie? Schreibe sie in eine Form, bei welcher die rechte Seite reell ist. (✎14)

□ Benenne drei Beispiele $(s,S)\in$ _Anfangswert_(ψ). (✎15)

□ Wie steht die erhaltene Schrödingergleichung mit der Diffusionsgleichung $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\phi(s,x(s))\right]\big|_{s=t} = D\cdot\mathbb{D}_{(h,h)}\psi(t,s(t))$ im Zusammenhang? Stelle Ähnlichkeiten und Unterschiede heraus. (✎16)

□ Betrachte die Dispersionsreihe (✎17)

$$E(p) = \sum_{n(x)=0}^{\infty}\sum_{n(y)=0}^{\infty}\sum_{n(z)=0}^{\infty}c(n(x),n(y),n(z))\cdot p(1)^{n(x)}\cdot p(2)^{n(y)}\cdot p(3)^{n(z)}.$$

Wie kann man die Reihe umdefinieren für Operatoren? In welchem Raum liegt $\mathscr{E}_E := E(\mathscr{o})$, wenn $\mathscr{o} = -\mathring{\imath}\,\hbar\cdot\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)}$?

(✎18) ☐ Verallgemeinere mit dem Operator $\mathscr{E}_E$ die Gleichung auf beliebige Dispersionen.

. . . .

VL 4 03.05.2023, 08:15

Um eine Lösung dieser partiellen Differentialgleichung zu erhalten, müssen wir mit dem Seperationsansatz beginnen.

Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wir spalten unser ϕ in die Funktionen ϕ und χ auf nach der Form $\psi(t, r(t)) = \phi(r(t)) \cdot \chi(t)$. Wir nehmen hierbei an, daß dies problemlos möglich ist; typische Tücken des Seperationsansatz. Wir fordern sogar weiter, daß $\int |\psi(t, r(t))| \, \lambda\,(dt) = 1$, sodaß die implizite Bedingung $\chi(t) \neq 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$ folgt. Setzen wir diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir

$$\phi(r(t)) \cdot \mathring{i}\,\hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[\chi(s)\right]\big|_{s=t} = \chi \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \cdot \mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)}\phi\,(t)\,.$$

. . . .

(✎19) ☐ Rechne nach, daß $\int |\psi(t, r(t))| \, \lambda\,(dt) = 1$ zu $\chi(t) \neq 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$ führt.

. . . .

Nun ist der weitere Ansatz das Dividieren durch $\phi(r(t))$ und $\chi(t)$, um gemäß der Seperationschablone zeit- und ortsabhängige Funktionen voneinander zu trennen. Für $\chi(t)$ wissen wir durch unsere Annahme, daß sie ungleich Null sein wird; Für $\phi(r(t))$ müssen wir eine Fallunterscheidung machen. Schematisch erhalten wir zunächst

$$\mathring{i}\,\hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[\chi(s)\right]\big|_{s=t} \cdot \frac{1}{\chi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)}\chi\,(t) \cdot \frac{1}{\phi(r(t))} = \mathit{const.} =: E.$$

Mit dem Analyseblick erkennen wir $(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t))/\chi(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ln(t)$, sodaß

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[\chi(s)\right]\big|_{s=t} = -\frac{\mathring{i} \cdot E}{\hbar} \Leftrightarrow \chi(t) = C_1 \cdot \exp\left(-\frac{\mathring{i} \cdot E \cdot t}{\hbar}\right),$$

Wobei die Konstante C_1 Resultat der Integration $\int f dt$ ist. Für die rechte Seite gilt zunächst

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)}\phi\,(r(t)) = E \cdot \phi(r(t)),$$

schematisch nahe der *Laplace-Gleichung*. Wir haben es hierbei konkret mit einem *verallgemeinerten Eigenwertproblem* zutun, welche wir spezieller in [→ math. Grund. der Quant.] behandeln werden. In diesem Kontext reicht uns der Name *zeitunabhängige Schrödingergleichung*. Der ausstehenden Fallunterscheidung kommen wir nun nach: Für $\phi(r(t)) = 0$ erhalten wir $\mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)}\phi\,(r(t)) = 0$, wodurch die Schrödingergleichung ebenfalls gilt; Wir hatten also bei unserem zunächst frei angenommenen Seperationsansatz Glück.

. . . .

(✎20) ☐ Begründe, warum die Annahme der Konstante E im Seperationsansatz gerechtfertigt ist.

(✎21) ☐ Zeige, daß aus $\phi(r(t)) = 0$ folgt, daß $\mathrm{D}_{(\hbar,\hbar)}\phi\,(r(t)) = 0$.

. . . .

Als *Lösungen* der zeitunabhängigen Schrödingergleichung erhalten wir $\phi(r(t)) = C_2 \cdot \exp\left(\mathring{i} \cdot \langle k, r(t)\rangle\right)$, welche der Form einer implizit zeitunabhängigen *ebenen Welle* entspricht. Zusammengesetzt gilt für ψ demnach

$$\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\left(\mathring{i} \cdot \left(\langle k, r(t)\rangle - \frac{\hbar \cdot k^2}{2m} \cdot t\right)\right),$$

wobei wir $E = \hbar^2 \cdot k^2/(2m)$ setzen.

1.3 Allgemeine Form der Schrödingergleichung

Bisherig nahmen wir an, daß unsere betrachteten Teilchen *kräftefrei* sind. Erweitern wir unseren Blick auf *konservativ kräftebefallene* Teilchen, existiert ein Kraftpotential V sodaß $F(t, r(t)) = -dV(t, r(t))(h)$ gilt. Im klassischen Betrachtungsfall haben wir bereits die *Hamiltonfunktion* kennengelernt:

$$H(t, (r(t), p(t))) = \frac{p(t)}{2m} + V(t, r(t)).$$

Wir wollen nun die Schrödingergleichung erraten: angenommen, wir haben ein sehr schmales Wellenpaket relativ zur Änderung von V, sodaß wir eine gute Approximation von V am Ort $(t, r(t))$ durch $V(t_0, r(t_0))$ erhalten. Für die Funktion $p \mapsto H(t, (r, p))$ mit der Dispersionsreihe $\mathscr{E}$ erhalten wir

$$\mathring{i}\,\hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s, r(s))\right]\Big|_{s=t} = \mathscr{E}_H(\psi(t, r(t)))(= H(t, (r(t), -\mathring{i}\,\hbar\nabla))),$$

wobei der geklammerte Term eine *Schreibweise* zur Erinnerung an die klassische Hamiltonfunktion ist. Damit folgt die *allgemeinste* Version der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für einzelne Teilchen als fundamentalen quantenmechanischen Zusammenhang:

$$\mathring{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[\psi(s, r(s))\right]\Big|_{s=t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)} + V(t, r(t))\right)(\psi(t, r(t))).$$

Es handelt sich hier wieder um ein AWP: Die Gleichung löst sich also eindeutig für einen Anfangswert $(s, S) \in \mathrm{AW}(\psi)$.

....

□ Wie muss man $t_0 \in \mathbb{R}$ wählen, sodaß die Approximation von V ausreichend gut ist? Was bedeutet „schmal relativ zur Änderung von V“? (✎22)

□ Wie sieht die suggerierte Auswertung des Ausdrucks $(\cdot + \cdot)(\psi(\cdot))$ aus? Was bedeutet die Schreibweise? (✎23)

□ Kläre den Zusammenhang der Schrödingergleichung mit der Newtongleichung $F = ma$. Recherchiere dazu im Nolting und beachte die folgende Optikanalogie: (✎24)

Mechanik	Optik
Schrödingergleichung	Wellenoptik
$\updownarrow$	$\updownarrow$
klassische Mechanik	geometrische Optik

□ Schlage alternative Formulierungen der Schrödingergleichung nach. Beachte als Beispiel die *Feynmanschen Pfadintegrale* ausgehend von Langrangian. (✎25)

....

In dem Ausdruck kann man schon den *Hamilton-Operator* identifizieren: $\hat{H} := -(\hbar^2)/(2m) \cdot \mathbb{D}_{(\hbar,\hbar)} + V(t, r(t))$, welchen wir näher in [→ math. Grund. der Quant.] betrachten. Sogar in diesem verschachtelt sehen wir $\hat{p} := -\hbar \cdot \mathbb{D}_{\hbar}$, auch näher in [→ math. Grund. der Quant.] (*dringend empfohlen*).

. . . .

(✎26) ☐ Meditiere eine halbe Stunde über den letzten Sätzen. Lege dir das Skript der Funktionalanalysis und der mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik bei.

. . . .

Eine wichtige Neuheit der Quantenmechanik lässt sich hier bereit feststellen: Die *Observablen* werden durch *Operatoren* dargestellt. Diese sind *linear* und (meist) *selbstadjungiert* auf einem geeigneten Hilbertraum. Wir sprechen hierbei von dem *Korrespondenzprinzip*. Wir werden später noch sehen, daß unsere Operatoren die Eigenschaft *hermitesch*, im Sinne von *symmetrisch*, *dicht definert* und *abgeschlossen*, erfüllen.

Explizit zeitunabhängiger Fall

Einzig im explizit zeitunabhängigen Fall $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{H} = 0$ funktioniert der oben beschriebene Seperationsansatz $\psi = \phi \cdot \chi$. In diesem Fall erhalten wir wieder ein verallgemeinertes Eigenwertproblem.

Literatur