

- Würde $\beta(p)$ im Intervall $(p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$ stark variieren, so würde $\exp\{i\beta(p)/\hbar\}$ stark oszillieren und den Integralwert (2.36) klein halten.

- Das Zentrum des Wellenpakets liegt bei den Werten von x , für welche die „Bedingung der stationären Phase“

$$\left. \frac{d\beta}{dp} \right|_{p=p_0} = 0 \quad (2.38)$$

erfüllt ist. D.h. mit (2.37):

$$x = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=p_0} t = \frac{p_0}{m} t \quad (2.39)$$

- Das Zentrum des Wellenpaketes bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m} t \quad (2.40)$$

- Wegen $E = \hbar\omega$ und $p = \hbar k$ gilt auch

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}, \quad k_0 = \frac{p_0}{\hbar} \quad (2.41)$$

- Die Gruppengeschwindigkeit unterscheidet sich von der Phasengeschwindigkeit einer Teilwelle

$$v_p = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{E(p)}{p} = \frac{p}{2m}$$

$$\begin{aligned} (2.35) & \\ &= \frac{1}{2} v_g \quad (2.42) \\ & p=p_0 \end{aligned}$$

2.5. Die Heisenbergsche Unschärferelation

2.5.1. Allgemeine Formulierung

• Seien \underline{r}_0 und \underline{p}_0 die Schwerpunkte eines Wellenpaketes im Orts- bzw. Impulsraum:

$$\underline{r}_0 = \langle \underline{r} \rangle_{|\Psi|^2} = \int d^3 \underline{r} \Psi^*(\underline{r}, t) \underline{r} \Psi(\underline{r}, t) \quad (2.43)$$

$$\underline{p}_0 = \langle \underline{p} \rangle_{|\Phi|^2} = \int d^3 \underline{p} \Phi^*(\underline{p}, t) \underline{p} \Phi(\underline{p}, t) =$$

$$\stackrel{!}{=} \int d^3 \underline{r} \Psi^*(\underline{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\underline{r}, t) \quad (2.44)$$

und $\Delta x, \Delta p_x$ die Wurzeln aus den quadratischen Abweichungen einer Komponente (analog $\Delta y, \Delta p_y, \Delta z, \Delta p_z$):

$$\begin{aligned} \Delta x &= \langle (x-x_0)^2 \rangle_{|\Psi|^2}^{1/2} = \\ &= \left\{ \int d^3 \underline{r} \Psi^*(\underline{r}, t) (x-x_0)^2 \Psi(\underline{r}, t) \right\}^{1/2} \quad (2.45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta p_x &= \langle (p-p_0)^2 \rangle_{|\Phi|^2}^{1/2} = \\ &= \left\{ \int d^3 \underline{p} \Phi^*(\underline{p}, t) (p_x-p_{0x})^2 \Phi(\underline{p}, t) \right\}^{1/2} \quad (2.46) \end{aligned}$$

so gelten die Ungleichungen

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\} \quad (2.47)$$

• keine Ungleichungen für gemischte (nichtkonjugierte) Koordinaten, z.B. $\Delta x \cdot \Delta p_y = 0$

2.5.2 Stabilität des H-Atoms

- Kleinsten mittleren Radius $r \approx \Delta r$
- Kleinsten mittleren Impuls $p \approx \Delta p$

$$\Rightarrow r \cdot p \approx \hbar$$

• Folgt:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \quad (2.48)$$

• Minimalenergie bei r_0 mit

$$\frac{dE}{dr} = 0 = -\frac{\hbar^2}{mr_0^3} + \frac{e^2}{r_0^2} \quad (2.49)$$

$$\Rightarrow r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad E_0 = -\frac{e^2}{2r_0} \quad (2.50)$$

• Vgl (1.47) (1.48)

2.6. Energie-Zeit-Unschärfe

• Schreibe $\Psi(t) := \Psi(\underline{r}_0, t)$ für festen Ort \underline{r}_0 .

• Sei $\Psi(t)$ ein Puls (oder Wellenpaket in der Zeit) mit Breite Δt .

• Fouriertransformierte in der Zeit:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(t) &= (2\pi)^{-1/2} \int d\omega G(\omega) e^{-i\omega t} \\ G(\omega) &= (2\pi)^{-1/2} \int dt \Psi(t) e^{i\omega t} \end{aligned} \right\} (2.51)$$

• $G(\omega)$ hat die Frequenzbreite mit (2.47):

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2} \quad (2.52)$$

- Wegen $E = \hbar \omega$ gilt:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.53)$$

- Interpretation:

Wenn ein Zustand nur eine Zeit Δt existiert, kann die Energie nur auf $\sim \hbar / 2\Delta t$ genau gemessen werden.

- Energiescharfe Zustände: leben ∞ lange
- Angeregte Zustände: zerfallen nach Δt durch die Emission von Licht.
- Natürliche Linienbreite $\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t}$

3 Die Schrödingergleichung

3.1. Vorbemerkungen

- Ziel: Systematische Berechnung der Wellenfunktion für ein Teilchen unter beliebigen Kräften.
- Forderung für Gleichung:
 - linear und homogen für Gültigkeit des Superpositionsprinzips (2.6)
 - Korrespondenzprinzip
 - Dgl. erster Ordnung in der Zeit: Aus $\Psi(r, t = t_0)$ folgt eindeutig $\Psi(r, t)$.

3.2. Die zeitabhängige Schrödingergleichung

3.2.1. Freies Teilchen

$$\Psi(r, t) = A e^{i\{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - E(\mathbf{p})t\}/\hbar} \quad (2.7)$$

• Es gilt:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} \Psi &:= \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi = \mathbf{p} \Psi \\ \hat{E} \Psi &:= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E \Psi \end{aligned} \right\} (2.8)$$

• Ferner ist klassisch:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = f(\mathbf{p}) \quad (3.1)$$

- Sei Ψ Eigenvektor (-funktion) zum Operator $\hat{\mathbf{p}}$ mit Eigenwert \mathbf{p} , so ist Ψ auch Eigenvektor zum Eigenwert $f(\mathbf{p})$ des Operators $f(\hat{\mathbf{p}})$ im Sinne einer Potenzreihenentwicklung.

• Also gilt für die Wellenfunktion (2.7):

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \Psi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi = E \Psi \stackrel{(2.8)}{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (3.2)$$

• Ψ erfüllt die „zeitabhängige Schrödingergleichung“ für ein freies Teilchen:

$$\hat{E} \Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi \quad (3.3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (3.4)$$

• Linear, homogen, Korrespondenzprinzip erfüllt.

Bilde aus Grundoperatoren die klassischen Gleichungen nach, z.B. aus \hat{p} den Operator \hat{T} für die kinetische Energie

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (3.5)$$

und setze:

$$\hat{E} \Psi = \hat{T} \Psi \quad (3.6) \quad / \text{2.1.}$$

3.2.2. Teilchen im Potenzial

• Natürliche Erweiterung von (3.6) für ein Teilchen in einem Potenzial $V(\underline{r}, t)$:

Klassisch $E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}, t) \quad (3.7)$

QM $\hat{E} \Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi + V(\hat{\underline{r}}, t) \Psi \quad (3.8)$