wobei $\hat{\underline{r}}\,\Psi$ einfach die Multiplikation von Ψ mit den Ortskoordinaten bedeutet.

- Mit der Operatordarstellung

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla \qquad (2.9)$$

wird (3.8) zur zeitabhängigen Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem Potenzial:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\underline{r},t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r},t) \right\} \Psi(\underline{r},t)} \qquad (3.9)$$

- Es ist $H = T+V = H(\underline{r},\underline{p},t)$ die Hamiltonfunktion für das Teilchen.
- Zur Aufstellung der Schrödingergleichung erstelle den „Hamiltonoperator"

$$\hat{H}(\hat{\underline{r}},\hat{\underline{p}},t) = H(\underline{r},\frac{\hbar}{i}\nabla,t)$$

und schreibe:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\underline{r},t) = \hat{H}\Psi(\underline{r},t)} \qquad (3.10)$$

- Partielle Dgl., erster Ordnung in t, i.A. zweiter Ordnung in $\underline{r}$, linear, homogen, Korrespondenzprinzip !

3.2.3. Stetigkeitseigenschaften

- $V(\underline{r},t)$ stetig: Ψ, $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$, $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$ stetig

- $V(\underline{r},t)$ unstetig mit endlichem Sprung in $\underline{r}$:

  $\Delta\Psi$ unstetig, Ψ, $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$, $\nabla\Psi$ stetig.

- $V(\underline{r},t)$ mit Sprung in t: $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ unstetig, Ψ stetig.

3.3. Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

3.3.1. Verlangt Hermitizität des Hamiltonoperators

- Bornsche statistische Interpretation der Wellenfunktion:

$$P(\underline{r},t) = |\Psi(\underline{r},t)|^2 \qquad (3.11)$$

ist Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

- Deshalb muss die Wellenfunktion für alle Zeiten quadratintegrabel und normierbar sein:

$$\int d^3\underline{r}\, P(\underline{r},t) = \int d^3\underline{r}\, |\Psi(\underline{r},t)|^2 = 1 \qquad (3.12)$$

- Ist (3.12) für eine Wellenfunktion erfüllt, welche der Schrödingergleichung gehorcht?

- Prüfe:

$$\frac{d}{dt}\int d^3\underline{r}\, P(\underline{r},t) = \int d^3\underline{r}\, \frac{\partial P}{\partial t}(\underline{r},t) =$$

$$= \int d^3\underline{r}\, \frac{\partial}{\partial t}\{\Psi^*\Psi\} = \int d^3\underline{r}\, \left\{\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)\Psi\right\} \qquad (3.13)$$

- Schrödingergleichung (^ weggelassen)

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{\hbar i} H\Psi \qquad (3.14)$$

$$\text{cc} \qquad \left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^* = -\frac{1}{i\hbar}(H\Psi)^* \qquad (3.15)$$

• In (3.13):

$$\frac{d}{dt}\int d^3\underline{r}\; P(\underline{r},t) =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3\underline{r}\;\{\Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi\} = 0 \qquad (3.16)$$

$$\Longleftrightarrow \int d^3\underline{r}\;\Psi^*(H\Psi) = \int d^3\underline{r}\;(H\Psi)^*\Psi \qquad (3.17)$$

für alle quadratintegrable Ψ

$\Longleftrightarrow$ H ist ein hermitescher Operator.

3.3.2. Hermitesche Matrizen und Operatoren

a) Unitäres Produkt in $\mathbb{C}^n$

• Seien $\underline{u},\underline{v} \in \mathbb{C}^n$ und

$$\langle \underline{u}|\underline{v}\rangle := \sum_{i=1}^{n} u_i^*\, v_i \qquad (3.18)$$

ein unitäres inneres Produkt.

• Vgl. im Funktionenraum:

$$\langle f|g\rangle := \int d^3\underline{r}\; f^*(\underline{r})\, g(\underline{r}) \qquad (3.19)$$

• Es gilt:

$$\langle \underline{u}|\underline{v}\rangle = \langle \underline{v}|\underline{u}\rangle^* \qquad (3.20)$$

• $\langle\,|\,\rangle$ ist linear in $\underline{u}$ und antilinear in $\underline{v}$:

$$\langle a_1\underline{v}_1 + a_2\underline{v}_2|\underline{u}\rangle = a_1^*\langle\underline{v}_1|\underline{u}\rangle + a_2^*\langle\underline{v}_2|\underline{u}\rangle \qquad (3.21)$$

• Sei $A \in \mathbb{C}^{(n,n)}$ eine Komplexe $n \times n$-Matrix

Die „hermitesch Konjugierte" oder „adjungierte" Matrix A^+ ist definiert durch

$$\langle \underline{u} | A^+ \underline{v} \rangle := \langle \underline{v} | A \underline{u} \rangle^* \qquad (3.22)$$

oder ~~mit~~ (3.20):

$$\langle \underline{v} | A \underline{u} \rangle = \langle A^+ \underline{v} | \underline{u} \rangle$$
$$\overset{(3.22)}{=} \langle \underline{u} | A^+ \underline{v} \rangle \overset{(3.20)}{\neq}$$

d.h. $u_i^* A^+_{ij} v_j = (v_j^* A_{ji} u_i)^* = u_i^* A^*_{ji} v_j \qquad (3.23)$

also $A^+_{ij} = A^*_{ji}$ bzw $A^+ = A^{t*} \qquad (3.24)$

• A ist selbstadjungiert oder hermitesch, wenn gilt:

$$A^+ = A \qquad (3.25)$$

d.h. $v_i^* (A\underline{u})_i = (A\underline{v})^*_i u_i \qquad (3.26)$ vgl. (3.17)

oder $\langle \underline{v} | A \underline{u} \rangle \underset{(3.25)}{\overset{(3.22)}{=}} \langle A \underline{v} | \underline{u} \rangle \qquad (3.27)$

16.1.

Sätze

i) A lässt sich stets zerlegen in $A = A_h + A_a$ mit

$$A_h^+ = A_h \text{ und } A_a^+ = -A_a \text{ (anti herm.)} \qquad (3.28)$$

ii) A ist genau dann hermitisch, wenn

$$\langle \underline{u} | A \underline{u} \rangle = \langle \underline{u} | A \underline{u} \rangle^*$$

für alle $\underline{u} \in \mathbb{C}^n \qquad (3.29)$