Ist wieder eine Lösung (Superpositionsprinzip): $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ ist Lsg

Dispersionsrelationen:

= Beziehung zwischen Energie E und Impuls $p = |\vec{p}|$

bzw wegen $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ zwischen ω und $\vec{k}$ ($k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$, $k^2 = \vec{k}\cdot\vec{k}$)

* haben bereits gesehen für

Bsp: Wellen (insbes. Licht) $\boxed{\omega(k) = \pm v \cdot k}$ (Licht $v = c$)

aus S. 2 $E = \hbar\omega = c \cdot \hbar k$ f. Licht

Gibt es andere Dispersionsrelationen?

Bsp: kinetische Energie eines freien Teilchen mit Masse $m \neq 0$ (nicht-relativistisch)

$$\boxed{E = \frac{m}{2}\vec{v}^2 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}} = \hbar\omega(\vec{k}) \Leftrightarrow \boxed{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$

ein Lösung!

Bsp: relativistische Energie eines freien Teilch.

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$$ m_0 Ruhemasse des Teilchens (mehr dazu später im Teil II der Vorl.)

$m_0 = 0$: $E = pc$

$m_0 > 0$: $E = m_0c^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0c^2}} \overset{c \gg 1}{=} m_0c^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m_0^2c^2} + O\left(\frac{1}{m_0^2c^4}\right)\right)$

$$= \underbrace{m_0c^2}_{\text{Ruheenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{p^2}{m_0}}_{\text{nichtrelativistische kin. Energie}} + O\left(\frac{1}{m_0c^2}\right)$$

d.h. enthält beide als Grenzfall

* Gesucht: 3D Differentialgleichung, die obige (nicht-rel.) Dispersion realisiert,

für $\Psi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$ Ansatz

$$E\,\Psi(\vec{r},t) = \hbar\omega(\vec{k})\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

und $$\vec{p}\,\Psi(\vec{r},t) = \hbar\vec{k}\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

$\vec{\nabla}_{\vec{r}} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ in 3D

$$\Rightarrow \vec{p}^2\Psi = -\hbar^2\vec{k}^2\Psi = -\hbar^2\vec{\nabla}^2\Psi$$

$\vec{\nabla}^2 = \Delta$ Laplace-Operator d.h. damit $\frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k)$ erfüllt ist muß gelten:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\Psi(\vec{r},t)}$$

Schrödinger - Gleichung eines freien qm. Teilchens (in D Dimensionen)

* es gibt weitere Diff. gl. die auch die relativistische Dispersions-relation erfüllen, die Klein-Gordon und die Dirac-Gl. (später: QM II - Vorlesung)

* wir werden auf die "Ersetzung" von klassischen Größen wie Energie und Impuls durch Differentialoperatoren zu sprechen kommen

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to i\hbar\vec{\nabla}$$

Fourier - Analyse

- es stellt sich heraus, daß in der QM viele Probleme durch Fourier-Transformation (FT oder Fourier-Trafo) gelöst werden können.

zur Erinnerung: in 1 (Raum)-Dimension $\left(f(x) \xrightarrow{FT} \tilde{f}(k) \right)$

durch $f(x) \to$ $\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx}$

und Rücktrafo $\tilde{f}(k) \to$ $f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \tilde{f}(k)\, e^{+ikx}$

unter Benutzung der Dirac - δ Funktion $\delta(k-q) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi}\, e^{i(k-q)x}$

Check $f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \tilde{f}(k)\, e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, e^{-iky} e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, \delta(x-y)$

$= f(x)$ ✓

- es heißen auch $f(x)$ Darstellung im Koordinatenraum und $\tilde{f}(k)$ Darstellung im Fourier, k-Raum, oder Impulsraum

Fourier-Trafo in 3 (Raum-) Dimensionen:

Hin-Trafo $f(\vec{r}) \to \tilde{f}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r}\, f(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\vec{r}}$

($\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz$ oder in anderen Koord.)

Rücktrafo $\tilde{f}(\vec{k}) \to f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{k}\, \tilde{f}(\vec{k})\, e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

mit $\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r}\, e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{r}} = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{q}) = \delta(k_x-q_x)\delta(k_y-q_y)\delta(k_z-q_z)$

in kartesischen Koord.

* Warum brauchen wir keine 4 Dim FT von $\Psi(\vec{r},t)$?

$$\Psi(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\Psi}(\vec{k},\omega)\, e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}$$

Konvention

wir hatten eine best. Dispersionsrelation beabsichtigt, also

z.B. $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$, d.h. $\tilde{\Psi}(\vec{k},\omega) = \Phi(\vec{k})\,\delta(\omega-\omega(\vec{k}))\,2\pi$

$$\Rightarrow \Psi(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\, \Phi(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega(\vec{k})t}$$

reicht aus, wenn $\omega = \omega(\vec{k})$ wie entspr. gewählt.

Bsp: Lösung der 1D Wellengleichung

- mit zuHilfenahme der FT

$$\boxed{\partial_t^2 y(x,t) = v^2 \partial_x^2 y(x,t)}$$ lineare partielle Diff.gl.

Ansatz: $y(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$

$$\Rightarrow \partial_t^2 y(x,t) = (-i\omega)^2 y(x,t) \overset{!}{=} v^2 \partial_x^2 y(x,t) = v^2 (ik)^2 y(x,t)$$

$\Leftrightarrow \omega^2 = v^2 k^2$, $\omega_\pm = \pm v k$ wie gehabt

Superpositionsprinzip f. lineare Gl. auch Summe bzw. Integral ist eine Lösung: wähle z.B. $\omega_+ = vk$, mit $\phi(k)$ allgem. (integrierbar)

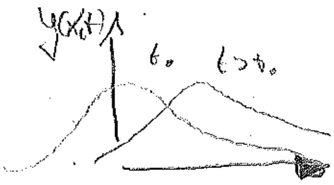
$$\Rightarrow \quad y(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \phi(k)\, e^{ik(x-vt)}$$ ist allgem. Lsg zu ω_+

stelle Anfangsbed., z.B. $y(x,t=0) = f(x)$: $f(x) = \int \frac{dk}{2\pi}\, \phi(k)\, e^{ikx}$

$\Rightarrow \phi(k) = \tilde{f}(k)$ die FT von $f(x)$,

Rücktrafo mit geschobenem Argument

$$\Rightarrow \quad \boxed{y(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{f}(k)\, e^{ik(x-vt)} = f(x-vt)}$$



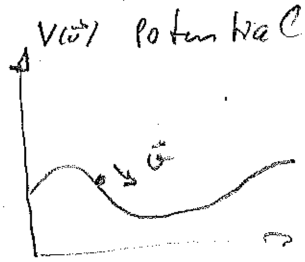
fliegt nach rechts, Lsg zu ω_- fliegt nach links

d.h. $y(x,t) = f(x-vt) + g(x+vt)$ (hätten wir auch raten können)

Allgem. Lsg: FT (Wellengl) $\Rightarrow$ gewöhnl. Diff gl. 2. Ordnung Lsg eindeutig best. durch Anfangsbed. $y(x,0)$, $\dot{y}(x,t=0)$ bzw deren FT.

Verallgemeinerung: Schrödingergleichung mit Wechselwirkungen (WW)

- in der klassischen Mechanik hängt die Gesamtenergie E eines Teilchens von Ort $\vec{r}$ ($=\vec{q}$) und Impuls $\vec{p}$ ab



$\rightarrow$ es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Bewegungsgleichungen zu formulieren (Newton, Lagrange) hier Hamilton (siehe Theo I)

$E = H(\vec{p}, \vec{q})$ Hamiltonfunktion (hier 1 Teilchen, $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$, $\vec{q} = (x, y, z)$)

z.B. $H(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{q})$; $\vec{p}$ (verallgem.) Impulse, $\vec{q}$ (verallgem.) Koord.

mit Bewegungsgl $$\boxed{\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{q_i, H\}} \quad i = x, y, z$$

$$\boxed{\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \{p_i, H\}} \quad \text{—"—}$$

mittels Poissonklammer $\{f, g\} = \sum_{a=x,y,z} \left(\frac{\partial f}{\partial q_a} \frac{\partial g}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a} \frac{\partial g}{\partial q_a} \right) = -\{g, f\}$

wobei q_a und p_b unabhängig, d.h. $\frac{\partial p_a}{\partial q_b} = 0 = \frac{\partial q_a}{\partial p_b}$, $\frac{\partial q_a}{\partial q_b} = \delta_{ab} = \frac{\partial p_a}{\partial p_b}$

oder $\boxed{\{q_a, p_b\} = \delta_{a,b}}$

$\Rightarrow$ damit können die Bewegungsgl. berechnet werden, wenn $H = H(\vec{p}, \vec{q})$ bekannt, insbesondere gilt für die Zeitableitung

$$\boxed{\frac{d}{dt} f = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}}$$

Umsetzung in der QM: ersetze $E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \to -i\hbar \vec{\nabla}$, $\vec{q} = \vec{r}$ bleibt

im Ortsraum

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H(-i\hbar\vec{\nabla}, \vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t)}$$

zeitabh. Schrödingergl. für ein qm. Teilchen mit WW, also z.B.

von oben $\boxed{H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \to -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \hat{H}}$ Hamilton (Differential) operator

(wenn wir die GL FT sieht das anders aus = Impulsraum)

* Bemerkung: wenn wir die Poisson-Klammer durch den Kommutator $[A, B] = AB - BA$ ersetzen, erfüllen

$p_a = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_a} \equiv -i\hbar \partial_{q_a}$ und q_a folgenden elementaren Kommutator

wirkt auf Objekte rechts stehend

$$\boxed{[q_a, p_b]} = q_a(-i\hbar \partial_{q_b}) - (-i\hbar \partial_{q_b}) q_b$$ Kettenregel

$$= q_a(-i\hbar \partial_{q_b}) + (i\hbar \underbrace{\frac{\partial q_b}{\partial q_a}}_{\delta_{ab}}) + i\hbar q_b \partial_{q_a}$$

$$\boxed{= i\hbar \delta_{ab}}$$

Born-Jordansche Vertauschungsrelation.

* zum formalen Zugang zur QM mittels Operatoren auf einem Hilbertraum kommen wir später!