

## Review      Expectation value of momentum $\vec{p}$

$$\langle \hat{\vec{P}} \rangle = \langle \vec{p} \rangle(t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\Psi}^*(\vec{k}, t) \hbar \vec{k} \tilde{\Psi}(\vec{k}, t)$$

$$= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}, t) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}}_{\hat{\vec{P}}} \Psi(\vec{r}, t)$$

momentum operator  $\hat{\vec{P}}$  in mom. coord. space

## General expectation value of operator $\hat{O}$

$$\langle \hat{O} \rangle = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{O} \Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\Psi}^*(\vec{k}, t) \hat{O} \tilde{\Psi}(\vec{k}, t)$$

## Heisenberg uncertainty relation

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Coordinate and momentum in same direction cannot be sharply measured at the same time

## Schrödinger equation

for particle of mass  $m$  in potential  $V$

time-dep. S-eqn. = equation of motion for  $\Psi$

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

with Hamiltonian  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$  Energy = kinetic + potential energy  
special case:  $V$  is indep. of time  
in coord. space for local potential  $V(\vec{r})$

Solution  $\Psi(\vec{r}, t)$  of time-dep. S-eqn. obeys

continuity equation  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$   $\rho = |\Psi|^2$   
 $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$

and conserves norm  $\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1 \quad \forall t$

time-indep. S-eqn., when  $V$  is time-indep.

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \Psi(\vec{r}) \text{ is stationary}$$

with  $\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad E \in \mathbb{R}$

→ not only norm is time-indep., but also  $\rho$  and  $\vec{j}$  are time-indep.

- Vorlesung heute:
- Zeitunabh. Schrödingergleichung ✓
  - 4. Eindimensionale Probleme ✓
  - Unendlicher Potentialtopf ✓
  - Endlicher Potentialtopf

Zeitunabh. Schrödingerlg.

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Lin. Alg.  $A \vec{v} = a \vec{v}$   
matrix

Eigenwertfg.:  $\Psi(\vec{r})$  ist Eigenfkt. von  $\hat{H}$  mit Eigenwert  $E$

Was ist  $E$ ? Erwartungswert von  $\hat{H}$ :

$$\langle \hat{H} \rangle = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{H} \Psi(\vec{r})}_{E \Psi(\vec{r})}$$

NB:  $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$  fällt raus

$$= E \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = E$$

→  $E \in \mathbb{R}$  ist Energie des Zustands (zunächst im Sinne von Erwartungswert / Mittelwert)

Was ist Schwankung  $\Delta E$ ?

$$\begin{aligned} (\Delta E)^2 &= \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{H}^2 \Psi(\vec{r})}_{E^2 \Psi(\vec{r})} - E^2 \\ &= E^2 - E^2 = 0 \end{aligned}$$

→ Für stat. Zustand ist  $E$  die Energie des Zustands (scharf messbar)  
 $\langle \hat{H} \rangle = E, (\Delta E)^2 = 0$

⇒ Lösung der zeitunabh. Schrödingerlg.  $\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$

mit Normierung  $\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = 1$

gibt möglichen Energiewert  $E$

→ später in Vorlesung zum Wasserstoffatom: nur diskret  $E_i$  möglich  
 $E_i \rightarrow E_j: E_i - E_j = h\nu$  Spektrallinien