(6) Freies Teilchen in der Quantenmechanik

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} \rightsquigarrow H_0 = \frac{P^2}{2m}$$

In der Koordinatendarstellung

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}\,.$$

Eigenvektorgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dq^2} = E\psi\,.$$

Keine Eigenfunktionen (Lösungen in L^2). Ist $E = \frac{k^2}{2m} > 0$, so hat man zwei beschränkte Lösungen

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \longrightarrow \psi_k^{(\pm)}(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\pm i\frac{k}{\hbar}q}\,.$$

In der Momentumdarstellung:

$$\frac{p^2}{2m}\hat\psi(p) = E\hat\psi(p) = \frac{k^2}{2m}\hat\psi(p) \rightsquigarrow$$

zwei (distributionale) Lösungen $\hat\psi^{\pm}(p) = \delta(p \pm k)$

Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H_0\psi(t)$$

mit dem Anfangsdatum $\psi(0) = \psi_0$, $\|\psi_0\| = 1$.

In der Momentumdarstellung:

$$\left.\begin{aligned} &i\hbar\frac{\partial\hat\psi(p,t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\hat\psi(p,t) \\ &\hat\psi(p,0) = \hat\psi_0(p)\,, \quad \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(p)|^2\,dp = 1 \end{aligned}\right\}$$

$$\rightsquigarrow \quad \hat\psi(p,t) = \hat\psi_0(p)\, e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$$

In der Koordinatendarstellung,

$$\psi(q,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipq}{\hbar}}\,\hat\psi(p,t)\,dp =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\varphi}_0(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}\chi(p,q,t)t}\, dp \quad \text{mit} \quad \chi(p,q,t) = -\frac{p^2}{2m} + \frac{pq}{t}$$

Physikalische Interpretation: Sei Anfangszustand so, dass $\hat{\varphi}_0(p)$ ist eine glatte Funktion mit kompakten Träger in einer kleinen Umgebung U_0 von $p_0 \neq 0$ $(0 \notin \bar{U}_0)$, mit $\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\varphi}_0(p)|^2 dp = 1$. (Genannt „Wellenpacket"). Dann $\forall$ kompakte $K \in \mathbb{R}$ gilt

$$\lim_{t \to \pm\infty} \int_K |\psi(q,t)|^2 dq = 0 .$$

Da

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q,t)|^2 dq = 1, \qquad \forall t \in \mathbb{R}$$

Bedeutet das, daß das Teilchen jede kompakte Menge verläßt, sodaß seine Bewegung unendlich ist.

$$\psi(q,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{U_0} e^{\frac{i}{\hbar}\chi(p,q,t)t}\, \hat{\varphi}_0(p)\, dp =$$

$$= -\frac{1}{it}\sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int_{U_0} \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{\hat{\varphi}_0(p)}{\frac{\partial\chi(p,q,t)}{\partial p}}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\chi(p,q,t)t}\, dp$$

$\left(\left|\frac{\partial\chi}{\partial p}\right| = \left| -\frac{p}{m} + \frac{q}{t} \right| > c \quad \forall p \in \bar{U}_0,\ \forall q \in K, \text{ wenn } |t| \text{ groß genug} \right)$

$\Rightarrow \quad \psi(q,t) = O(|t|^{-1})$ gleichmäßig auf K.

Analog zeigt man $\psi(q,t) = O(|t|^{-n})$ $\forall n \in \mathbb{N}$,

also $\psi(q,t) = O(|t|^{-\infty})$

Auf unbeschränkten Gebieten wird die Bewegung mit Hilfe der Methode der stationären Phase untersucht, (Sattelpunktnäherung)
sind $f, g \in C^\infty(\mathbb{R})$, f reellwertig, g mit kompakten Träger, so gilt für

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{itf(x)} g(x)\,dx$$

im Falle, daß f einen einzigen kritischen Punkt x_0 hat mit $f'(x_0)=0$ und $f''(x_0)\neq 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{itf(x)} g(x)\,dx \underset{t\to\infty}{=} \left(\frac{2\pi}{t\,|f''(x_0)|}\right)^{1/2} e^{itf(x_0)+\frac{i\pi}{4}\operatorname{sgn} f''(x_0)} g(x_0) + O\left(\frac{1}{t}\right)$$

In unserem Fall:
der kritische Punkt von $\chi(p,q,t) = -\frac{p^2}{2m}+\frac{pq}{t}$ ist $\chi'(p_0)=0 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \; -\frac{p_0}{m}+\frac{q}{t}=0$ mit $\chi''(p_0) = -\frac{1}{m}\neq 0$, so daß für $t\to\infty$ haben wir

$$\psi(q,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2\pi m}{t}}\, e^{it\chi(p_0,q,t) - \frac{i\pi}{4}}\hat{\psi}_0\left(\frac{mq}{t}\right) + O(t^{-1})$$

$$= \sqrt{\frac{m}{t}}\,\hat{\psi}_0\left(\frac{mq}{t}\right) e^{\frac{it}{\hbar}\left(-\frac{m^2q^2}{2m\,t^2}+\frac{mq}{t}\frac{q}{t}\right)-\frac{i\pi}{4}} + O(t^{-1})$$

$$= \sqrt{\frac{m}{t}}\,\hat{\psi}_0\left(\frac{mq}{t}\right) e^{\frac{imq^2}{2\hbar t}-\frac{i\pi}{4}} + O(t^{-1})$$

Der Träger dieser Funktion ist $\frac{t}{m}U_0$. Punkte dieses Trägers, wo die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zu finden, nicht verschwindet, bewegen sich mit der „klassischen" Geschwindigkeit $\frac{p}{m}=v$, $p\in U_0$. In diesem Sinne gilt $p=mv$. Die asymptotische Wellenfunktion genügt

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\sqrt{\frac{m}{t}}\,\psi_0\left(\frac{mq}{t}\right)e^{i\ldots}\right|^2 dq = \frac{m}{t}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_0\left(\frac{mq}{t}\right)\right|^2 dq =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(q)|^2\,dq = 1$$