**Ergänzung zu Abschnitt 3.1: Zeitenwicklung der Wellenfunktion**

Wellenfunktion zur Zeit $t = 0$:

$$\psi(x) = (\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{1}{4}}\, e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} e^{ik_0 x} \tag{1}$$

Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{2}$$

Ziel ist, die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion durch Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu bestimmen.

Der Hamiltonoperator (2) für die ungebundene Bewegung hat keine Eigenzustände im Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen. Man kann aber mit den kontinuierlich vielen "uneigentlichen" Eigenfunktionen des Impulsoperators (und damit auch des Hamiltonoperators)

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad -\infty < k < \infty \tag{3}$$

mathematisch in ähnlicher Weise wie mit diskreten Eigenfunktionen operieren, wobei allerdings die Summen durch entsprechende Integrale ersetzt werden müssen. Zum Beispiel lassen sich beliebige quadratintegrierbare Wellenfunktionen nach diesen Impulseigenfunktionen wie folgt entwickeln:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\psi_k(x)\, dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{ikx} dk \tag{4}$$

entwickeln, wobei für die Funktion der "Entwicklungskoeffizienten" gilt:

$$f(k) = (\psi_k, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-ikx} dk \tag{5}$$

Man kann also aus der Funktion $f(k)$ die ursprüngliche Funktion $\psi(x)$ wieder generieren. In der Mathematik wird dieses Verfahren Fouriertransformation genannt. Die physikalische Information von $\psi(x)$ und $f(k)$ ist identisch, $f(k)$ wird auch die Impulsdarstellung ($p = \hbar k$) von $\psi(x)$ genannt.

Als konkretes Beispiel soll die Impulsdarstellung $f(k)$ der Wellenfunktion (1) berechnet werden:

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} e^{(ik_0 - ik)x} dx \tag{6}$$

Mit quadratischer Ergänzung im Exponenten ergibt sich:

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha(x + \frac{i(k-k_0)}{\alpha})^2} dx$$

Das bestimmte Integral über die verschobene Gaußfunktion liefert $\sqrt{2\pi/\alpha}$ (wie für am Ursprung zentrierte Gaußfunktion). Es folgt

$$f(k) = (\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}\ e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\alpha}} \tag{7}$$

Die Funktion $f(k)$ ist also selber wieder eine Gaußfunktion mit Maximum an der Stelle $k = k_0$.

In Analogie zu dem in der Vorlesung besprochenen Fall diskreter Energieeigenfunktionen kann man jetzt die Lösung der zeitlichen Schrödingergleichung in der Form

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{\frac{-iE_k t}{\hbar}} e^{ikx} dk \tag{8}$$

schreiben, wobei $E_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ die kontinuierlichen (uneigentlichen) Energieeigenwerte sind. Man kann durch Einsetzen leicht nachprüfen, daß dieser Ansatz die zeitliche Schrödingergleichung erfüllt (dabei annehmen, daß zeitliche und räumliche Ableitungen mit der k-Integration vertauschen, also z.B. $\frac{\partial}{\partial t}\int \ldots dk = \int \frac{\partial}{\partial t} \ldots dk$); für $t = 0$ ergibt sich die anfängliche Wellenfunktion (1).

Auch hier läßt sich die k-Integration ausführen und ein geschlossenes Ergebnis für $\psi(x,t)$ bekommen. Mit dem bereits berechneten Ausdruck für $f(k)$ lautet das zu berechnende Integral:

$$\psi(x,t) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} (\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} exp\{-\frac{1}{2\alpha}[(k-k_0)^2 - 2i\alpha kx + \frac{i\alpha\hbar t k^2}{m}]\} dk \tag{9}$$

Der Integrand kann entsprechend

$$exp\{-\frac{1}{2\alpha}[k^2 b(t) - 2(k_0 + i\alpha x)k\} exp(-\frac{1}{2\alpha}k_0^2)$$

umgeformt werden, wobei

$$b(t) = 1 + \frac{i\alpha\hbar t}{m} \tag{10}$$

zur Abkürzung eingeführt wurde. Jetzt kann man wieder eine quadratische Ergänzung für den Exponenten vornehmen, was den Integranden in die folgende Form bringt:

$$exp\{-\frac{b(t)}{2\alpha}[k^2 - 2\frac{k_0 + i\alpha x}{b(t)}k + \frac{(k_0 + i\alpha x)^2}{b(t)^2}]\} exp\{-\frac{1}{2\alpha}k_0^2 + \frac{(k_0 + i\alpha x)^2}{2\alpha b(t)}\}$$

Wie oben kann man das bestimmte Integral über die verschobene Gaußfunktion jetzt ausführen ($\sqrt{2\alpha\pi/b(t)}$). Damit ergibt sich insgesamt folgendes Ergebnis für die Zeitentwicklung der Wellenfunktion:

$$\psi(x,t) = (\frac{\alpha}{\pi b(t)^2})^{\frac{1}{4}}\ e^{-\frac{k_0^2}{2\alpha} + \frac{(k_0 + i\alpha x)^2}{2\alpha b(t)}} \tag{11}$$

Der in der Vorlesung betrachtete Ausdruck für $|\psi(x,t)|^2$ läßt sich daraus ohne Schwierigkeiten berechnen. Es gilt

$$\begin{aligned} |\psi(x,t)|^2 &= \psi(x,t)\psi(x,t)^* \\ &= (\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{1}{2}} \frac{1}{|b(t)|} exp\{-\frac{k_0^2}{\alpha} + \frac{(k_0 + i\alpha x)^2}{2\alpha b(t)} + \frac{(k_0 - i\alpha x)^2}{2\alpha b(t)^*}\} \end{aligned} \tag{12}$$

Mit den Beziehungen $bb^* = 1 + \frac{\alpha^2\hbar^2 t^2}{m^2}$, $b + b^* = 2$ und $b - b^* = \frac{2i\alpha\hbar t}{m}$ gelangt man schnell zu dem bekannten Resultat,

$$|\psi(x,t)|^2 = (a(t)/\pi)^{\frac{1}{2}}\, e^{-a(t)(x - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}, \;\; a(t) = \alpha(1 + t^2/\tau^2)^{-1} \tag{13}$$

wobei $\tau = m/\alpha\hbar$ ein charakteristischer Zeitparameter ist.