

Vollständige Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{"Zustand"}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\underline{r}) \quad \text{mit } \left. \begin{array}{l} \hat{p} \text{ Impulsoperator} \\ \hat{r} \text{ Ortsoperator} \end{array} \right\} \text{Vektoroperatoren}$$

"Hamilton-Operator" (skalar)

Ortsdarstellung: $\psi \rightarrow \psi(\underline{r}, t)$
"Wellenfunktion"

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}} \quad \text{Differentialoperator}$$

$$\hat{r} \rightarrow \underline{r} \quad \text{multiplikativ}$$

Erwartungswert

betrachte z.B. Ort eines Teilchens

- nicht exakt voraussagbar (quantenmechan. Unschärfe!)
- Erwartungswert angebar durch viele Einzelmessungen an ~~selben~~ selben Teilchen

$$\langle \underline{r} \rangle = \int_{(\text{Raum})} d\underline{r} |\psi(\underline{r}, t)|^2 \hat{\underline{r}}$$

Wahrsch. dichte im Ortsraum

$$= \int d\underline{r} \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) \hat{\underline{r}}$$

$$\langle \underline{r} \rangle = \int d\underline{r} \psi(\underline{r}, t) \underline{r} \psi^*(\underline{r}, t)$$

Ortsoperator multiplikativ in der Ortsdarstellung!

Erwartungswert des Ortes in der Ortsdarstellung

Verallgemeinerung für Ortsabhängige Funktionen (z.B. $V(\underline{r})$)
 A Potential

$$\langle A(\underline{r}) \rangle = \int d\underline{r} \psi(\underline{r}, t) A(\underline{r}) \psi^*(\underline{r}, t) \quad (\otimes)$$

typischerweise zeitabhängig, da ψ von der Zeit abhängt!

analog: Definition von Schwankungen (diese messen Abweichung vom Mittelwert)

$$\langle (A(\underline{r}) - \langle A(\underline{r}) \rangle)^2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r} \underbrace{\psi^*}_{\psi^*(\underline{r}, t)} (A(\underline{r}) - \langle A(\underline{r}) \rangle)^2 \underbrace{\psi}_{\psi(\underline{r}, t)}$$

$$= \int d\underline{r} \psi^* (A(\underline{r}))^2 \psi - \int d\underline{r} \psi^* A(\underline{r}) \langle A(\underline{r}) \rangle \psi$$

$$- \int d\underline{r} \psi^* \langle A(\underline{r}) \rangle A(\underline{r}) \psi + \int d\underline{r} \psi^* \langle A(\underline{r}) \rangle^2 \psi$$

$$= \langle (A(\underline{r}))^2 \rangle - \left(\int d\underline{r} \psi^* A(\underline{r}) \psi \right) \langle A(\underline{r}) \rangle$$

$$- \langle A(\underline{r}) \rangle \int d\underline{r} \psi^* A(\underline{r}) \psi + \langle A(\underline{r}) \rangle^2 \int d\underline{r} \psi^* \psi$$

$$= \langle (A(\underline{r}))^2 \rangle - 2 \langle A(\underline{r}) \rangle \langle A(\underline{r}) \rangle + \langle A(\underline{r}) \rangle^2$$

$$= \langle (A(x))^2 \rangle - \langle A(x) \rangle^2$$

Häufig definiert man die mittlere quadrat. Schwankung

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A(x))^2 \rangle - \langle A(x) \rangle^2}$$

Größe unter der Wurzel ist
per Definitionen positiv,
siehe Vorlesung Rechnung

Betrachte nun den Erwartungswert des Impulses

Zunächst.

Berechnung über „Impulswellenfunktion“

Wir hatten in Kap. II.1

$$\Psi(x, t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dp e^{i/\hbar p \cdot x} \tilde{\Psi}(p, t=0)$$

$$\tilde{\Psi}(p, t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dx e^{-i/\hbar p \cdot x} \Psi(x, t=0) \quad \boxed{p = \hbar k}$$

Betrachte nun Sekunden $t=0$

$\Psi(x)$ und $\tilde{\Psi}(p)$ sind also gleichberechtigt Beschreibungen
des Zustands des (quantenmechan.) Teilchens!

$\tilde{\Psi}(p)$: Impuls-Wellenfunktion

es gilt: $\int_{\mathbb{R}^3} \underbrace{\psi^*(\underline{r}) \psi(\underline{r})}_{\text{Probekhaltswahrsch.}} = 1$

Nach dem Parseval'schen Theorem für Fouriersummenformeln gilt dann auch:

$$\int_{\text{Impuls-Raum}} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) = 1$$

Wir können die Größe $\tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p)$ also als Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum interpretieren!

$$\Rightarrow \langle p \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p) \hat{p} \tilde{\psi}(p) = \int dp \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p)$$

Impulsoperator wirkt multiplikativ in der Impulsdarstellung

Erwartungswert des Impulses in der „Impulsdarstellung“

(analog zu $\langle \underline{r} \rangle = \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}) \underline{r} \psi(\underline{r})$)

Alternativ

Berechnung des Erwartungswertes von \hat{p} in der Ortsdarstellung

↔ Beispiel für den „Darstellungswechsel“

$$\langle p \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p)$$

Existenz der
(inversen)
Fouriertransformation

$$= \int dp p \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dx e^{i\frac{p}{\hbar}x} \psi^*(x)}_{\tilde{\psi}^*(p)}$$

$$\times \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dx' e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \psi(x')}_{\tilde{\psi}(p)}$$

"mal"

$$= \int dx \psi^*(x) \int dx'$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp p e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} \psi(x')$$

Integrale
vertauscht

$$= \int dx \psi^*(x) \int dx'$$

$$\times \frac{\hbar}{i} \nabla_x \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} \psi(x')$$

"mal"

benutze (bekannt von Fouriertransformation, $k = \frac{p}{\hbar}$)

$$\delta(x-x') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}$$

$$\Rightarrow \langle p \rangle = \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \nabla_x \underbrace{\int dx' \delta(x-x') \psi(x')}_{\psi(x)}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{p} \rangle = \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}} \psi(\underline{r})$$

Erwartungswert des Impulses in der Ortsdarstellung!

anders ausgedrückt:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}) \hat{p} \psi(\underline{r})$$

mit $\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}}$
 (Impulsoperator in der Ortsdarstellung)

Man sieht auch:

Im allgemeinen ist die Reihenfolge der Größen unter dem Erwartungswert nicht egal!

symbolisch: $\psi^* \hat{A} \psi$

Analog:

$$\begin{aligned} \langle \hat{r} \rangle &= \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}) \hat{r} \psi(\underline{r}) \quad \left(= \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r}) \underline{r} \psi(\underline{r}) \right) \\ &= \dots = \int d\underline{p} \tilde{\psi}^*(\underline{p}) \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{p}} \right) \tilde{\psi}(\underline{p}) \end{aligned}$$

Also: Ortsoperatoren in der Impulsdarstellung:

$$\hat{r} \longrightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}} \quad \left(\text{mit } \nabla_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p_x} \\ \frac{\partial}{\partial p_y} \\ \frac{\partial}{\partial p_z} \end{pmatrix} \right)$$

Allgemein gilt für Funktionen des Orts- und Impulsoperators:

$$A(\hat{r}, \hat{p}) \longrightarrow \begin{cases} A(\underline{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}}) & \text{Ortsdarstellung} \\ A(-\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}, \mathbf{p}) & \text{Impulsdarstellung} \end{cases}$$

darstellungs-
unabhängig

Beispiele:

- Hamiltonoperator: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$

- Drehimpulsoperator: $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$

Begriff des „Kommutators“

In der Quantenmechanik sind der Orts- und Impulsoperator „nicht vertauschbar“ (sie „kommutieren nicht“)

definiere allgemein für zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B}

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (*)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] \begin{cases} = 0 & \text{„vertauschbar“} \\ \neq 0 & \text{nicht vertauschbar} \end{cases}$$

Beispiel:

$$[\hat{z}, \hat{p}_z] \quad ???$$

\hat{z} : z-Komponente des Ortsoperators

\hat{p}_z : z-Komponente des Impulsoperators

Bedingung in der Ortsdarstellung:

$$[\hat{z}, \hat{p}_z] \psi(r, t) \stackrel{(*)}{=} \underbrace{\hat{z} \hat{p}_z \psi(r, t) - \hat{p}_z \hat{z} \psi(r, t)}$$

$$= z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(r, t) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} (z \psi(r, t))$$

Produktregel!

$$= z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(r, t) - \frac{\hbar}{i} \psi(r, t) - \frac{\hbar}{i} z \frac{\partial}{\partial z} \psi(r, t)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \psi(r, t)$$

Man erkennt: $[\hat{z}, \hat{p}_z] = -\frac{\hbar}{i}$

darstellungunabhängig!

allgemein

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

$$-[\hat{x}_j, \hat{p}_i]$$

$$\left(\begin{array}{l} i, j = 1, 2, 3 \\ x_1 = x \\ x_2 = y \\ x_3 = z \end{array} \quad \text{bzw.} \quad \begin{array}{l} p_1 = p_x \\ p_2 = p_y \\ p_3 = p_z \end{array} \right)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$$

„fundamentale
Vertauschungsrelation“

Wir werden später sehen:

- Nichtvertauschbarkeit zweier Operatoren

\Leftrightarrow zugehörige physikalische Größen sind ^{nicht} gleichzeitig
scharf messbar !! (Heisenbergsche
Unschärferelation)

- Wenn zwei Operatoren vertauschen, dann haben sie
denselben Satz von „Eigenzuständen“ (Eigenfunktionen)

II.5. Einige Korrespondenzregeln

(Vervollständigung später)

„Kochrezept“ zur Lösung eines quantenmechanischen Problems

- 1) stelle klassische Hamiltonfunktion auf

$$H = H(\underline{M}_1, \dots, \underline{M}_N, f_1, \dots, f_N, t) \quad \text{für } N \text{ Teilchen}$$

$$\text{Konservatives System: } H = T + V = E \quad \text{Gravitationsenergie}$$

kinet. + potentiell
Energie

2) Ordne dem System einen quantenmechanische "Zustand" zu
 hier $N=1$

Zustand kann z.B. beschrieben werden durch

$$\Psi(\underline{r}, t) \quad \text{Wellenfunktion}$$

$$\tilde{\Psi}(\underline{p}, t) \quad \text{Impuls-Wellenfunktion}$$

(im Unterschied zum klass. Beschreibg mit $\underline{r}, \underline{p}$!)

3) Transformiere die Hamiltonfunktion in den
 Hamiltonoperator

Konservatives System $H(\underline{r}, \underline{p}) \rightarrow \hat{H}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}) = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\hat{\underline{r}})$

Je nach Darstellung

Ortsdarstellung: $\hat{H} = \hat{H}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}})$

Impulsdarstellung: $\hat{H} = \hat{H}(\frac{-\hbar}{i} \nabla_{\underline{p}}, \underline{p})$

ersta also	$\underline{r} \rightarrow \hat{\underline{r}}$
\underline{p}	$\rightarrow \hat{\underline{p}}$
Klass.	qm.

4) Setze diesen Hamiltonoperator in zeitabhängige
 Schrödingergleichung ein:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

darstellungsunabhängig

Bemerkung:
 Für ein konservatives System entspricht Scharif H als auch \hat{H}
 der Gesamtenergie E

Damit ergibt sich aus der Schrödingergleichung eine weitere Korrespondenz:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow E$$

II.6. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Betrachte System, in dem \hat{H} nicht explizit zeitabhängig ist

$$\hat{H} = \hat{H}(\underline{r}, \underline{p})$$

$$\text{z.B. } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\underline{r}) \quad \text{wobei } V \text{ zeitunabhängig}$$

Schrödingergl. in Ortsdarstellung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r})}_{\text{zeitunabhängig!}} \right) \psi(\underline{r}, t)$$



Partielle DGL

Lösung durch Separationsansatz

$$\psi(\underline{r}, t) = \varphi(\underline{r}) \chi(t)$$

Produkt