Vollständige Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\,\underbrace{\psi}_{\text{„Zustand"}}$$

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

"Hamilton-Operator" (skalar)

mit $\hat{\underline{p}}$ Impulsoperator, $\hat{\underline{r}}$ Ortsoperator } Vektoroperator

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

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

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

Erwartungswert

betrachte z.B. Ort eines Teilchens

- nicht exakt voraussagbar (quantenmechan. Unschärfe!)
- Erwartungswert angebbar durch viele Einzelmessungen am ~~[illegible]~~ selben Teilchen

$$\langle \underline{r} \rangle = \underbrace{\int d\underline{r}}_{\text{(Raum)}} \underbrace{|\psi(\underline{r}, t)|^2}_{\text{Wahrsch.dichte im Ortsraum}} \hat{\underline{r}}$$

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

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

Ortsoperator multiplikativ in der Ortsdarstellung!

Erwartungswert des Ortes in der Ortsdarstellung

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

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

typischerweise zeitabhängig, da ψ von der Zeit abhängt!

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

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

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

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

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

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

$$- \langle A(\underline{r})\rangle \underbrace{\int d\underline{r}\, \psi^* A(\underline{r}) \psi}_{\langle A(\underline{r})\rangle} + \langle A(\underline{r})\rangle^2 \underbrace{\int d\underline{r}\, \psi^* \psi}_{1}$$

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

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

Häufig definiert man die mittlere quadrat. Schwankung

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

Größe unter der Wurzel ist per definitionem positiv, siehe vorherige Rechnung

Betrachte nun den Erwartungswert des Impulses

Zunächst:
Berechnung über „Impulswellenfunktion"

Wir hatten in Kap. II.1

$$\psi(\underline{r}, t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\, \tilde{\psi}(\underline{p}, t=0)$$

$$\tilde{\psi}(\underline{p}, t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}\, e^{-\frac{i\underline{p}}{\hbar}\cdot\underline{r}}\, \psi(\underline{r}, t=0) \qquad \boxed{\underline{p} = \hbar\underline{k}}$$

$\boxed{\text{Betrachte im Folgenden } t=0}$

$\psi(\underline{r})$ und $\tilde{\psi}(\underline{p})$ sind also gleichberechtigte Beschreibung des Zustands des (quantenmechan.) Teilchens!

$\tilde{\psi}(\underline{p})$: Impuls-Wellenfunktion es gilt: $\int d\underline{r}\, \underbrace{\psi^*(\underline{r})\,\psi(\underline{r})}_{\text{Aufenthaltswahrsch.}} = 1$

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

$$\underbrace{\int d\underline{p}}_{\text{Impuls-Raum}}\ \tilde{\psi}^*(\underline{p})\,\tilde{\psi}(\underline{p}) = 1$$

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

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \langle \underline{p} \rangle &= \int d\underline{p}\ \tilde{\psi}^*(\underline{p})\ \hat{\underline{p}}\ \tilde{\psi}(\underline{p}) \\ &= \int d\underline{p}\ \tilde{\psi}^*(\underline{p})\ \underline{p}\ \tilde{\psi}(\underline{p}) \end{aligned}}$$

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 $\hat{\underline{p}}$ in der Ortsdarstellung

$\Leftrightarrow$ Beispiel für den „Darstellungswechsel"

$$\langle \underline{p} \rangle = \int d\underline{p} \; \tilde{\psi}^*(\underline{p})\, \underline{p}\, \tilde{\psi}(\underline{p})$$

Einsetzen der (inversen) Fouriertransformation

$$= \int d\underline{p}\, \underline{p} \; \overbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}\; e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\, \psi^*(\underline{r})}^{\tilde{\psi}^*(\underline{p})}$$

$$\underset{\text{„mal"}}{\times} \; \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}'\; e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}'}\, \psi(\underline{r})}_{\tilde{\psi}(\underline{p})}$$

Integrale vertauschen

$$= \int d\underline{r}\; \psi^*(\underline{r}) \int d\underline{r}'$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{p}\;\; \underline{p}\;\; e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}\;\; \psi(\underline{r}')$$

$$= \int d\underline{r}\; \psi^*(\underline{r}) \int d\underline{r}'$$

$$\underset{\text{„mal"}}{\times} \quad \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}\; \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{p}\;\; e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}\;\; \psi(\underline{r}')$$

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

$$\delta(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{p}\;\; e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}$$

$$\Rightarrow \langle \underline{p} \rangle = \int d\underline{r}\; \psi^*(\underline{r})\; \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}\; \underbrace{\int d\underline{r}'\; \delta(\underline{r}-\underline{r}')\, \psi(\underline{r}')}_{\psi(\underline{r})}$$

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

Erwartungswert des Impulses in der Ortsdarstellung!

anders ausgedrückt:

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

mit $\hat{\underline{p}} \to \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}$

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:

$$\langle \underline{r} \rangle = \int d\underline{r}\ \psi^*(\underline{r})\ \hat{\underline{r}}\ \psi(\underline{r}) \quad \left(= \int d\underline{r}\ \psi^*(\underline{r})\, \underline{r}\, \psi(\underline{r}) \right)$$

$$= \ldots\ldots = \int d\underline{p}\ \tilde{\psi}^*(\underline{p}) \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}} \right) \tilde{\psi}(\underline{p})$$

Also: Ortsoperator in der Impulsdarstellung:

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

Allgemein gilt für Funktionen des Orts- und Impulsoperators:

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

darstellungsunabhängig

Beispiele:

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

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

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:

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

$\hat{z}$: z-Komponente des Ortsoperators

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

Berechnung in der Ortsdarstellung:

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

Produktregel!

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

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

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

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

allgemein

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

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

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

„Fundamentale Vertauschungsrelation"

Wir werden später sehen:

- Nichtvertauschbarkeit zweier Operatoren
  $\Leftrightarrow$ zugehörige physikalische Größen sind nicht gleichzeitig scharf meßbar !! (Heisenberg'sche 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

$$H = H(\underline{r}_1, \ldots, \underline{r}_N, \underline{p}_1, \ldots, \underline{p}_N, t) \quad \text{für } N \text{ Teilchen}$$

Konservatives System: $H = \underbrace{T + V}_{\text{kinet. + potentielle Energie}} = E$ Gesamtenergie.

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

Zustand kann z.B. beschrieben werden durch

$\psi(\underline{r}, t)$ Wellenfunktion

$\tilde{\psi}(\underline{p}, t)$ Impuls-Wellenfunktion

(im Unterschied zu klass. Beschreibung mit $\underline{r}_1, \underline{p}_1$!)

3) Transformiere die Hamiltonfunktion in den Hamiltonoperator

Konservatives System

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

ersetze also
$\underline{r} \longrightarrow \hat{\underline{r}}$
$\underline{p} \longrightarrow \hat{\underline{p}}$
klass. qm.

Je nach Darstellung

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

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

4) Setze diesen Hamiltonoperator in zeitabhängige Schrödingergleichung ein:

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

darstellungsunabhängig

Bemerkung:
Für ein konservatives System entspricht sowohl 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

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

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

Schrödingergl. in Ortsdarstellung:

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

Partielle DGL

Lösung durch Separationsansatz

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

Produkt