Wh.: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}\psi(\underline{r},t)$

zeitabhängige SG

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{|\psi(\underline{r},t)|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeits-dichte}} = -\overbrace{\nabla\cdot}^{\text{Divergenz}}\underline{j}(\underline{r},t)$$

QM: $\underline{j}(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$

II.4. Erwartungswerte, Orts- und Impulsdarstellung

Aus der Interpretation von $|\psi(\underline{r},t)|^2$ als Aufenthaltswahrsch. folgt: Mit $|\psi|^2$ lassen sich Mittelwerte und Schwankungen berechnen!

Betrachte Mittelwert des Ort $\underline{r}$ des Teilchens

Definiere:

$$\langle\underline{r}\rangle = \int d\underline{r}\; |\psi(\underline{r},t)|^2\, \underline{r}$$

Mittelwert des Ortes

~~Wahr~~

Bemerkung:

- Implizit geht hier die Vorstellung (Tatsache) ein, daß der Ort i.a. nicht exakt ~~exakt~~ bestimmbar ist! (quantenmechan. Unschärfe)
- In der QM nennt man Mittelwert häufig auch „Erwartungswert"

Umschreiben:

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

„Erwartungswert des Ortes, berechnet in der Ortsdarstellung"!

noch allgemeiner für ortsabhängige Funktionen

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

Im allgemeinen ist der Erwartungswert zeitabhängig, da ~~auch~~ $\psi(\underline{r},t)$ von der Zeit abhängt!

Analog: Definition von Schwankungen.

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

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

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

häufig ~~man~~ definiert man noch die sogenannte
<u>mittlere quadratische Schwankung</u>

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

Betrachte nun den Erwartungswert
des Impulses $\underline{p}$

Idee: Berechnung über Impuls-Wellenfunktion!
(s. Kap. II 1.)

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

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

'Impulswellenfunktion

Es gilt (Parseval) $\int d\underline{r}\, \psi(\underline{r})\, \psi^*(\underline{r}) = 1 \xrightarrow{\text{Parseval}}$

$\underbrace{\psi(\underline{r})\,\psi^*(\underline{r})}$ Aufenthaltswahrsch.dichte im Ortsraum

$\xrightarrow{\text{Parseval}}$ $$\int dp\; \tilde{\psi}^*(p)\, \tilde{\psi}(p) = 1$$

$\Rightarrow$ Wir können also das Produkt $\tilde{\psi}^*(p)\,\tilde{\psi}(p)$ als Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum auffassen!

$\Rightarrow$ Erwartungswert des Impulses

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

in „Impulsdarstellung" !

alternativ können wir $\langle p \rangle$ auch in der Ortsdarstellung ausrechnen

→ Beispiel für „Darstellungswechsel"

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

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

Ersetzen der Transformationsformeln

$$\times \int d\underline{r}'\, e^{-i/\hbar\, \underline{p}\cdot\underline{r}'}\, \psi(\underline{r}')$$

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

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

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

$$\langle \underline{p} \rangle = \int d\underline{r}\; \psi^*(\underline{r})\, \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}} \int d\underline{r}'\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{p}\; e^{i/\hbar\, \underline{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}\, \psi(\underline{r}')$$

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

(folgt aus: $\delta(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{k}\, e^{i\underline{k}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}$
und $\underline{p} = \hbar\underline{k}$)

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

$$\int d\underline{r}'\, \delta(\underline{r}-\underline{r}')\, \psi(\underline{r}')$$

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

Erwartungswert des Impulses in der Ortsdarstellung $\left(\langle \underline{p} \rangle = \int d\underline{r}\, \psi^*(\underline{r})\, \hat{\underline{p}}\, \psi(\underline{r})\right)$

Man sieht:

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

Das hatten wir schon bei der Diskussion der SG gesehen!

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

$2m$

Ortsdarstellung: $\hat{\underline{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}$, $\hat{\underline{r}} \rightarrow \underline{r}$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})$$

Beachte auch zum Erwartungswert: Reihenfolge in den Integralen ist i.a. nicht egal!

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

Analog

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

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

Übung

Auswertung in der Impulsdarstellung!

also: $\hat{\underline{r}} \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}$ $\left(\text{mit } \nabla_{\underline{p}} = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z}\right)\right)$

Allgemein gilt für Funktionen des Orts- und Impulsoperators:

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

Beispiele:

- Hamiltonoperator:

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

- Drehimpulsoperator:

$$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$$

Vektorprodukt

sieht formal aus wie in der klass. Mechanik

Begriff des Kommutators

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

~~Kom~~ Definition des Kommutators:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$ Die Operatoren sind „vertauschbar"

$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \rightarrow$ „nicht vertauschbar"

später werden wir sehen:
Der Kommutator ist wichtig für Meßprozesse

$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \iff$ zugehörige physikalische Größe sind nicht gleichzeitig scharf meßbar!
(Heisenberg'sche Unschärferelation)

Betrachte nun speziell:

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

$\hat{z}$: z-Komponente des vektoriellen Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$

(oder $\hat{x}_3 \hat{=} \hat{z}$)

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

Berechnung über Ortsdarstellung:

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

$$= \cancel{z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\psi} - \frac{\hbar}{i}\psi - \cancel{\frac{\hbar}{i}z\frac{\partial}{\partial z}\psi}$$

$$\Rightarrow [\hat{z}, \hat{p}_z]\,\psi(\underline{r},t) = -\frac{\hbar}{i}\,\psi(\underline{r},t)$$

$$\neq 0$$

allg. ausgedrückt:

$$[\hat{z}, \hat{p}_z] = -\frac{\hbar}{i}\,\hat{1}$$

Einheitsoperator

(mit $\hat{1}\,\psi(\underline{r},t) = \psi(\underline{r},t)$)

d.h. $\hat{z}$ und $\hat{p}_z$ sind nicht gleichzeitig „scharf messbar"!

Allgemeine Relationen für die Komponenten von Orts- und Impulsoperator:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{ij}\,\hat{1}$$

$$\left(\begin{array}{l} i,j = 1,2,3 \\ x_1 = x,\ x_2 = y,\ x_3 = z \\ \text{analog für } p \end{array}\right)$$

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

II. 5. Einige Korrespondenzregeln

(Vervollständigung später)

⇒ „Kochrezept" zur Lösung eines quantenmechanischen Problems

1) Stelle klassische Hamiltonfunktion auf

$$H = (\underline{r}_1, \ldots, \underline{r}_N, \underline{p}_1, \ldots \underline{p}_N, t)$$

N-Teilchensystem ohne Zwangsbedingungen

Konservatives System:

$$H = T + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Potential}}}{V} = E$$

Gesamtenergie!

2) Ordne dem System einen quantenmechanischen „Zustand" zu

z.B. (N=1)

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

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

3) Schreibe die Hamiltonfunktion um in den Hamiltonoperator

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

$(N=1)$

Je nach Darstellung wirkt $\hat{H}$ wie folgt:

$\hat{H} = (\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}})$ oder $\hat{H} = (-\frac{\hbar}{i}\nabla_p, p)$

4) Setze diesen Hamiltonoperator in die zeitabhängige SG ein:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi} \quad (*)$$

Aus $(*)$ sieht man speziell für ein konservatives System noch eine weitere „Korrespondenz"
$(\hat{H} \to E)$ (zusätzlich zu $\hat{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}$ im Ort)

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

Gesamtenergie

Energie und Zeit hängen also zusammen!