

[Fortsetzung harmonischer Oszillator]

- **Explizite Berechnung der WF des HO**

$$\psi(y) \rightarrow \psi_n(y) = \sum_{k=0}^n a_k y^k e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k \stackrel{\alpha=2n+1}{=} \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k .$$

n = 0: wähle $a_1 = 0$, damit sind alle $a_{2k+1} = 0$, alle ungeraden Potenzen entfallen, WF gerade

$$\rightarrow \psi_0(y) = a_0 e^{-\frac{y^2}{2}} = c_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 1: wähle $a_0 = 0$, damit alle $a_{2k} = 0$, alle geraden Potenzen entfallen, WF ungerade

Rekursionsformel führt auf $a_3 = 0$, usw.

$$\rightarrow \psi_1(y) = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}} = c_1 2y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 2: wähle $a_1 = 0$, damit alle $a_{2k+1} = 0$, WF gerade

$$\text{Rekursionsformel führt auf } a_2 = \frac{2(0-2)}{(0+1)(0+2)} a_0 = -2a_0 .$$

$$\rightarrow \psi_2(y) = a_0(1-2y^2) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_2(4y^2-2) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 3: wähle $a_0 = 0$, also alle $a_{2k} = 0$, WF ungerade

$$\text{Rekursionsformel führt auf } a_3 = \frac{2(1-3)}{(1+1)(1+2)} a_1 = -\frac{4}{2 \cdot 3} a_1 = -\frac{2}{3} a_1 .$$

$$\rightarrow \psi_3(y) = a_1 \left(y - \frac{2}{3} y^3 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_3(8y^3 - 12y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 3: wähle $a_1 = 0$, ...

Alle WF $\psi_n(y)$ sind proportional zu einer Konstanten c_n . Diese vor der Normierung freien

Konstanten haben wir mit $c_0 = a_0$, $c_1 = \frac{a_1}{2}$, $c_2 = -2a_0$, $c_3 = -12a_1$ usw. so gewählt, dass die

WF in der Form

$$\psi_n(y) = c_n H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad H_n(y) := (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}) \quad (3.11)$$

darstellbar sind. Die Funktionen $H_n(y)$ heißen **Hermite'sche Polynome**.

Beweis: Für $f(y) = e^{-y^2}$ ist

$$\rightarrow f'(y) = -2ye^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_1(y) = 2y,$$

$$\rightarrow f''(y) = -2e^{-y^2} + 4y^2 e^{-y^2} = (4y^2 - 2)e^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_2(y) = 4y^2 - 2,$$

$$\rightarrow f'''(y) = 4ye^{-y^2} + 8y^2 e^{-y^2} - 8y^3 e^{-y^2} = (12y - 8y^3)e^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_3(y) = 8y^3 - 12y,$$

\rightarrow usw.

Bemerkung: Gleichung (3.5) gehört zu den ODE der Form $g_2(x)y'' + g_1(x)y' + g_0(x)y = 0$, die sich durch orthogonale Polynome lösen lassen. (vgl. Abramowitz/Stegun, Pocket book of mathematical functions (selected material), Kap. 22.6, S. 340):

	$g_2(x)$	$g_1(x)$	$g_0(x)$	$y(x)$
22.6.19	1	- 2x	2n	$H_n(x)$
22.6.20	1	0	$2n + 1 - x^2$	$e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$

5-5-15

Nach Rücktransformation zu dimensionsbehafteten Größen mit (3.3) $y = \frac{x}{b}$, $b := \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$ folgt

$$\psi_n(x) = c_n H_n\left(\frac{x}{\sqrt{b}}\right) e^{-\frac{x^2}{2b}} = c_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Die Konstanten c_n werden aus der Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1$ ermittelt (\rightarrow

Übungsblatt).

Bem.: Alternativ zu der rekursiven Bestimmung von c_n (\rightarrow Übungsblatt) lassen sich die zu berechnenden Ausdrücke auf das Integral

$$\int_0^{\infty} dy y^n e^{-r^2 y^2} = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2r^{n+1}}, \quad n+1, r > 0 \quad \text{zurückführen.}$$

Zur Erinnerung: Die Gamma-Funktion

$$\Gamma(x) := \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1}, \quad \Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad \text{mit } \Gamma(n) = n! \text{ für natürliche Zahlen } n, \quad \Gamma(1) = 1$$

verallgemeinert n Fakultät $n! := n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1$

auf reelle Zahlen x . Grafik von $\Gamma(x) \rightarrow$ Bronstein, S. 155.

Insgesamt erhalten wir folgende WF für den eindimensionalen harmonischen Oszillator

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{WF des HO.} \quad (3.12)$$

- **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten für harmonisch gebundene Quanten**

QM: Aus (4.10) folgt für die Wahrscheinlichkeit $w_n(x)$, ein qmT mit Energie E_n im Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen, der Ausdruck

$$w_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^n n!} \left[H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \right]^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{AWD für den HO}$$

KM: Die Wahrscheinlichkeit $w_{kl}(x)$, das klassische Teilchen an einem Punkt x aus dem Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen ist proportional zum Zeitintervall dt , in dem das Teilchen die Strecke dx durchläuft. Da jedes dx pro Periodendauer T zweimal durchlaufen wird, folgt für die "AWD des klassischen Teilchens"

$$w_{kl}(x) dx = 2 \frac{dt}{T} = 2 \frac{\frac{dx}{v}}{2\pi} = \frac{\omega}{\pi} \frac{dx}{v(x)}.$$

Für die Abhängigkeit der Geschwindigkeit v vom Ort x finden wir mit $x(t) = a \cos(\omega t)$

$$v(t) = -a \omega \sin(\omega t) \quad \text{also} \quad v(x) = \pm a \omega \sqrt{1 - \cos^2(\omega t)} = \pm a \omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} = \omega(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}. \quad \text{Also ist}$$

$$w_{\text{kl}}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}} & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } |x| \geq a \end{cases}.$$

Obwohl w^{kl} an den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung divergiert, ist die Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w_{\text{kl}}^2(x) = 1 \quad \text{erfüllt, denn}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w_{\text{kl}}(x) = \int_{-a}^a dx \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}} \stackrel{a^2 > x^2}{=} \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \Big|_{-a}^a = \frac{1}{\pi} [\arcsin(1) - \arcsin(-1)] = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right) \right] = 1$$

$$\text{oder (ii) } \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} dx w_{\text{kl}}(x) = \frac{\int_{T/2}^{T/2} dt}{T/2} = 1.$$

Die Schwingungsamplitude a ist wegen $E = \frac{m}{2} v^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{m}{2} a^2 \omega^2$ gleich $a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$.

Für hohe Werte der Quantenzahl n (hoch angeregte Zustände) nähern sich klassische und quantenmechanische AWD an

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n(x)|^2 = w_{\text{kl}}(x),$$

FAZIT WF und AWD des HO (vgl. Abbildung folgende Seite sowie Übungsblatt)

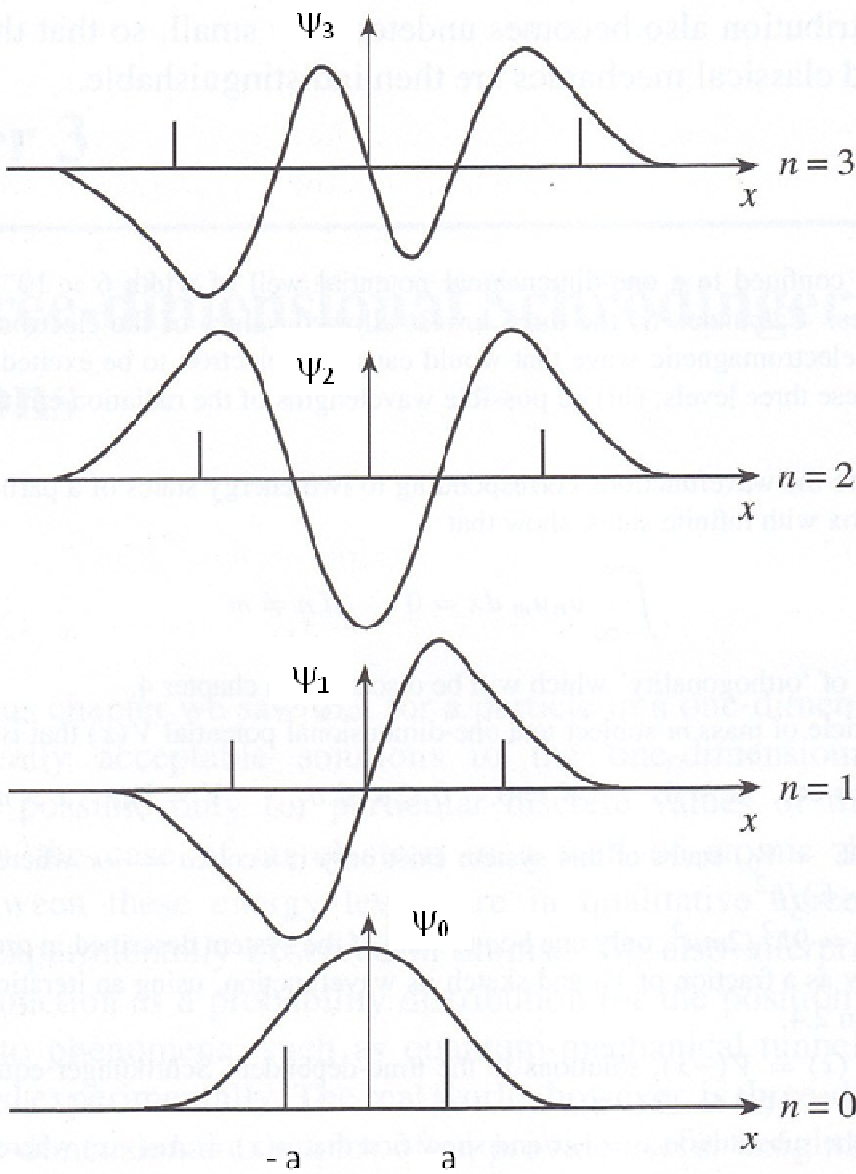
- WF des HO gerade oder ungerade, Knotensatz erfüllt
- "oszillierende"/exponentiell abklingende WF im klassisch erlaubten/verbotenen Bereich der Bewegung
- mit steigender Quantanzahl n zunehmend schärfer ausgeprägten lokalen Maxima von $w_n(x)$ in der Nähe der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung, dabei aber $\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n(x)|^2 = w_{\text{kl}}(x)$.

variation of the adjacent maxima and minima in the quantum-mechanics probability distribution also becomes smaller, so that the probability distribution approaches the classical probability distribution.

Chapter 3

particle is confined to a one-dimensional potential well. The energy levels of the eigenfunctions are shown in the figure. The energy levels are labeled $n=0, 1, 2, 3$ and the corresponding wave functions are labeled $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3$.

The wave functions $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3$ are shown in the figure. The wave function ψ_0 is a single positive peak. The wave function ψ_1 has one node. The wave function ψ_2 has two nodes. The wave function ψ_3 has three nodes.



The figure shows the probability density $|\psi_{10}|^2$ versus position x . The horizontal axis is labeled x and has vertical tick marks at $-a$ and a . The vertical axis is labeled $|\psi_{10}|^2$. The plot shows a series of oscillations within a well-defined envelope. The envelope is shown as a dashed line, and the oscillations are shown as a solid line. The oscillations are more frequent in the center of the well and become less frequent as they approach the boundaries $-a$ and a .

- **Orthogonalität der WF des HO**, $U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ **zu unterschiedlichen Quantenzahlen n**

$$\begin{array}{l} \psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - U(x)] \psi_1(x) = 0 \\ \psi_k''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_k - U(x)] \psi_k(x) = 0 \end{array} \quad \left| \begin{array}{l} \psi_k \\ -\psi_1 \end{array} \right.$$

$$\psi_k \psi_1'' - \psi_1 \psi_k'' = \frac{d}{dx} (\psi_k \psi_1' - \psi_1 \psi_k') = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \psi_k \psi_1$$

Nach Integration beider Seiten in $[a, b]$ folgt $\psi_k \psi_1' \Big|_a^b - \psi_1 \psi_k' \Big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \int_a^b dx \psi_k \psi_1$.

Offensichtlich haben wir $\psi_k(x), \psi_1(x) \rightarrow 0$ für $|x| \rightarrow \infty$. Damit ergibt sich im Grenzfall $a \rightarrow -\infty$ und $b \rightarrow \infty$

$$0 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k(x) \psi_1(x) \quad \begin{cases} = 0 & \text{für } k \neq 1 \\ \neq 0 & \text{für } k = 1 \end{cases}$$

Unter Berücksichtigung der Normierung finden wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k(x) \psi_l(x) = \delta_{kl} \rightarrow \text{die Wellenfunktionen sind orthonormiert!}$$

Weil wir die explizite Form von $U(x)$ nicht verwendet haben, gilt das nicht etwa nur für den HO, sondern für die Bewegung in allen `vernünftigen` $U(x)$ und, wie sich bald herausstellen wird, noch viel allgemeiner.

Für den HO folgt $0 = \frac{2m}{\hbar^2 b} (E_k - E_l) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} H_k\left(\frac{x}{b}\right) H_l\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{b^2}}$, also sind die

gewichteten Hermite'schen Polynome orthonormiert.

Bemerkungen:

(i) Während das klassische Teilchen im Potenzialminimum ruhen kann ($E = 0$, $x = 0$, $p_x = 0$, $w_{kl}(x) = \delta(x)$), liegt der Grundzustand des qmT bei $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ mit $w_0(x) = |\psi_0(x)|^2 \sim e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$.

Wir werden sehen, dass $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$ eine Konsequenz aus der Unschärferelation (UR) ist, die im vorliegenden Fall die gleichzeitige scharfe Messung von Ort und Impuls einschränkt. Es wird sich zeigen, dass $E_0 = \hbar\omega/2$ der kleinste mit der UR vereinbare Wert der Energie des HO ist.

(ii) Isotroper ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 =: \omega$) dreidimensionaler HO $\rightarrow U(\underline{r}) = \frac{m\omega^2}{2}r^2$. Zu lösen ist nun die Gleichung

$$\hat{H}\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2}{2}r^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2).$$

Da $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$, $\hat{H}_i := -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2$, $i = 1, 2, 3$, bietet sich der Separationsansatz

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \Psi_{n_x}(x) \cdot \Psi_{n_y}(y) \cdot \Psi_{n_z}(z)$$

an, wobei die $\Psi_{n_i}(x_i)$ die WF des eindimensionalen HO sind (nachprüfen).

Das Energiespektrum ist wie zu erwarten diskret

$$E_n = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n := n_1 + n_2 + n_3 \quad (\text{nachprüfen})$$

aber im Gegensatz zum eindimensionalen Fall sind bis auf den Grundzustand $E_0 = 3/2 \hbar\omega$ alle Zustände entartet, denn E_n hängt nur von der Summe $n = n_1 + n_2 + n_3$ der Quantenzahlen n_i ab. Dem ersten angeregten Zustand $E_1 = 5/2 \hbar\omega$ entsprechen drei WF Ψ_{100} , Ψ_{010} , Ψ_{001} , dem zweiten angeregten Zustand die WF Ψ_{200} , Ψ_{020} , ..., Ψ_{110} , ... usw. Der Entartungsgrad ist

$$\sum_{n_1=0}^n (n - n_1 - 1) = (n+1)(n+2)/2 \quad (\text{warum?}).$$

Ursache der Entartung ist die Symmetrie des Potenzials. Wird diese gebrochen, spalten sich die Energieniveaus auf ...

4. Quantenmechanische Erwartungswerte

Aus der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (AWD) $w(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ ergibt sich für die mittlere Koordinate/Position eines sich in x-Richtung ($-\infty < x < \infty$) bewegenden qmT

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \cdot x \cdot \psi(x, t). \quad (4.1)$$

1. Frage: Wie berechnet sich der mittlere Impuls dieses qmT?

Dazu benötigen wir die WD $\tilde{w}(p, t)$ dafür, dass der Impuls p zum Zeitpunkt $t \in (t, t + dt)$ den Wert $p \in (p, p + dp)$ annimmt. Zur Bestimmung von $\tilde{w}(p, t)$ betrachten wir die Fourier-Transformierte $\phi(p, t)$ von $\psi(x, t)$ (vgl. Fourier-Transformation und Fourier-Integral auf dem ersten Übungsblatt) entsprechend

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p, t) e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad \text{bzw.} \quad \phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t) e^{-i\frac{p}{\hbar}x}. \quad (4.2a/b)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi(p, t)|^2 &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi^* \phi &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\phi^*(p,t)} \cdot \phi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\psi(x,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1. \end{aligned}$$

Die Relation $\int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi(p, t)|^2 = 1$ (das Parseval'sche Theorem der Fourier-Transformation) legt

nahe, $|\phi(p, t)|^2 dp$ als die gesuchte Wahrscheinlichkeit $\tilde{w}(p, t) dp$ aufzufassen. Damit ergibt sich für den Erwartungswert/ Mittelwert des Impulses der Ausdruck

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\phi(p, t)|^2.$$

2. Frage: Kann man den quantenmechanischen Erwartungswert $\langle p \rangle$ durch die "ursprüngliche"

WF $\psi(x,t)$ ausdrücken (wir unterdrücken die Variable t im Folgenden)?

Wir haben

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, p |\phi(p,t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \phi(p) p \phi^*(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \phi(p) p \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\phi^*(p)} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, p \phi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \phi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{\psi(x)} \end{aligned}$$

Infolgedessen gilt $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \hat{p} \psi(x)$ mit $\hat{p} := -i\hbar \frac{d}{dx}$.

Analog finden wir $\langle p^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, p^n |\phi(p,t)|^2 = \dots = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \hat{p}^n \psi(x)$,

und wenn wir voraussetzen, dass die Funktion $f(p)$ in eine Taylor-Reihe entwickelbar ist,

$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, f(p) |\phi(p,t)|^2 = \dots = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) f(\hat{p}) \psi(x), \text{ wobei i.a. } \langle f(p) \rangle \neq f(\langle p \rangle).$$

Im dreidimensionalen Fall wird aus $x \rightarrow \underline{r}$, aus $p \rightarrow \underline{p}$, aus $dx \rightarrow d^3r$ und aus $dp \rightarrow d^3p$. Die analoge Rechnung führt auf

$$\langle \underline{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\underline{x} \, \psi^*(\underline{x}) \hat{\underline{p}} \psi(\underline{x}) \quad \text{mit} \quad \hat{\underline{p}} := -i\hbar \underline{\nabla} = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}. \quad (4.3)$$

Wir nennen den Operator $\hat{\underline{p}}$ den **Impulsoperator** des qmT.

Den quantenmechanischen Erwartungswert einer klassischen Phasenraumvariablen, einer sogenannten Observablen, $Q(\underline{p}, \underline{r}, t)$ im Zustand $\psi(\underline{r}, t)$ schreiben wir in der Form

$$\langle Q \rangle_{|\psi\rangle} = \int d^3r \, \psi^*(\underline{r}, t) \hat{Q} \psi(\underline{r}, t) \quad (4.4)$$

Dieser Erwartungswert bezieht sich stets auf einen bestimmten Zustand beschrieben durch die WF $\psi(\underline{r},t)$

$\psi(\underline{r},t)$ und $\phi(\underline{p},t)$ enthalten die gleichen (vollständigen) Informationen über den Zustand des qmT/qm Systems und können als unterschiedliche Darstellungen der WF aufgefasst werden.

	"Orts-Darstellung" der QM	"Impuls-Darstellung" der QM
	WF: $\psi(\underline{r},t)$	WF: $\phi(\underline{p},t)$, FT von $\psi(\underline{r},t)$
	Lösung der SG	Lösung der FT-SG ¹⁾
Observable		
Ort	Ortsoperator: $\hat{\underline{r}} = \underline{r}$	Ortsoperator: $\hat{\underline{r}} = i\hbar \underline{\nabla}_p$ ²⁾
Impuls	Impulsoperator: $\hat{\underline{p}} = -i\hbar \underline{\nabla}$	Impulsoperator: $\hat{\underline{p}} = \underline{p}$
Drehimpuls
$\underline{Q}(\underline{p},\underline{r},t)$	$\hat{Q} = Q(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla})$	$\hat{Q} = Q(\underline{p}, i\hbar \underline{\nabla})$

¹⁾ Übung: Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung

²⁾ selbständig analog zur Vorgehensweise oben herleiten

An dieser Stelle sei an die früher bereits verwendete kompakte Schreibweise der SG für die Bewegung eines qmT in $U(\underline{r},t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r},t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\underline{r},t) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 + U(\underline{r},t) = \frac{(-i\hbar \underline{\nabla})^2}{2m} + U(\underline{r},t) = H(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla}, t)$$

erinnert. stationäre SG $\hat{H} \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})$ ist die Eigenwertgleichung für den Hamilton-Operator \hat{H} . Die WF sind die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators und die Energieniveaus die dazugehörigen Eigenwerte.

Fazit: Ordne einer klassischen Observablen $Q(\underline{p}, \underline{r}, t)$ in der Quantenmechanik den Operator

$$\hat{Q} = Q(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla}) \text{ zu und löse das Eigenwertproblem } \hat{Q}\psi_n = q_n \psi_n .$$

Wir werden sehen, dass die Eigenwerte q_n die möglichen Messwerte der Observablen Q in einem durch ψ_n beschriebenen Zustand sind.

- Impuls: $\hat{\underline{p}} = -i\hbar \underline{\nabla}$, $\hat{\underline{p}}\psi(\underline{r}) = \hbar \underline{k}\psi(\underline{r})$ mit EF $\psi(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\underline{r}}$
- Energie: $\hat{H}\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r})$
- analog $\hat{\underline{L}}, \hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{T}$ usw.

- **Korrespondenz zwischen klassischer Mechanik (KM) und der Schrödinger'schen Wellenmechanik (QM) im Lichte der Hamilton-Jacobi-Theorie**

Bevor wir uns in der kommenden Woche der axiomatischen Formulierung der QM zuwenden, diskutieren wir zum Abschluss der Kapitel zur Schrödinger'schen Wellenmechanik eine Möglichkeit, die KM als Grenzfall der QM aufzufassen.

Dazu betrachten wir wieder die Bewegung eines Teilchens in einem Potentialfeld $U(\underline{r}, t)$, die vollständig durch die Hamilton-Funktion $H = \underline{p}^2 / 2m + U(\underline{r}, t)$ gegeben ist. In der KM kann die Bahnkurve des klassischen Teilchens aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG)

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H(\underline{r}, \underline{\nabla} S, t) = \frac{1}{2m} (\underline{\nabla} S)^2 + U(\underline{r}, t)$$

ermittelt werden. In der QM ist die Schrödinger-Gleichung (SG)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \stackrel{\text{Korrespondenz-}}{=} \text{prinzip} \quad H(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\underline{r}, t) \Psi \quad (\hat{\underline{r}} = \underline{r}, \quad \hat{\underline{p}} = -i\hbar \underline{\nabla})$$

für die Wellenfunktion zu lösen. Dazu machen wir den Lösungsansatz:

$$\Psi(\underline{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\underline{r}, t)} \quad \text{mit} \quad S(\underline{r}, t) = S_0(\underline{r}, t) + i\hbar S_1(\underline{r}, t) + (i\hbar)^2 S_2(\underline{r}, t) + \dots$$

Wenn wir uns auf den ersten und zweiten Term in der Reihenentwicklung nach Potenzen von $i\hbar$ beschränken, ist

$$\Psi(\underline{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} (S_0 + i\hbar S_1)} = e^{\frac{i}{\hbar} S_0 - S_1} =: a(\underline{r}, t) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\underline{r}, t)} \quad . \quad (\text{H1})$$

Eingesetzt in die SG finden wir unter Verwendung von

$$\begin{aligned}\underline{\nabla}\Psi &\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0} \left(\underline{\nabla}a + \frac{i}{\hbar}a \underline{\nabla}S_0 \right) \\ \underline{\nabla}^2\Psi &\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0} \left[\underline{\nabla}^2a + \frac{2i}{\hbar}\underline{\nabla}a \cdot \underline{\nabla}S_0 - \frac{1}{\hbar^2}a(\underline{\nabla}S_0)^2 + \frac{2i}{\hbar}a \underline{\nabla}^2S_0 \right] \\ i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} &\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_0} \left(i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S_0}{\partial t} \right)\end{aligned}$$

die Relation $a \frac{\partial S_0}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}(\underline{\nabla}S_0)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a \underline{\nabla}^2S_0 - \frac{i\hbar}{m}\underline{\nabla}a \cdot \underline{\nabla}S_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2a + Ua = 0$. (H2)

Die Terme der Ordnung \hbar^0 in (H2) ergeben (für $a \neq 0$)

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\underline{\nabla}S_0)^2 + U = 0,$$

d.h., die Phase der Wellenfunktion S_0 genügt der HJG: Im Sinne eines ‘Grenzübergangs’

QM $\xrightarrow{\hbar \rightarrow 0}$ KM ist die HJG der klassische Grenzfall der SG.

Die Terme nächst höherer Ordnung (\hbar^1) in (H2) ergeben $\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m}a \underline{\nabla}^2S_0 + \underline{\nabla}a \cdot \underline{\nabla}S_0 = 0$.

Nach Multiplikation mit $2a$ ergibt sich daraus die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}a^2 + \operatorname{div}\left(a^2 \frac{\underline{\nabla}S_0}{m}\right) = 0. \tag{H3}$$

Zur Interpretation von (H3) ist es hilfreich, die AWD $|\Psi(\underline{r}, t)|^2$ in der betrachteten Näherung

(H1) auszurechnen: $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = e^{\frac{i}{\hbar}S_0 - S_1} e^{-\frac{i}{\hbar}S_0 - S_1} = e^{-2S_1} = a^2$.

Also handelt es sich bei (H3) um die Kontinuitätsgleichung für die AWD. Wir erkennen, dass die durch die Wellenfunktion beschriebene Bewegung nicht in eine Bewegung entlang einer bestimmten Bahnkurve übergeht. Stattdessen verschiebt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte

$|\Psi(\underline{r}, t)|^2$ im Laufe der Zeit in Übereinstimmung mit den Gesetzen der KM, denn $\frac{\underline{\nabla}S_0}{m} = \frac{\underline{p}}{m}$

ist ja die Geschwindigkeit des klassischen Teilchens.