

# Chapter 1

## Die Schrödinger - Gleichung

Die in [A2 Quantenphysik](#) diskutierten Phänomene zeigen, daß Wellen Teilcheneigenschaften haben, und umgekehrt. Dabei sind für freie Teilchen, bzw. Wellen, die Größen Energie  $E(\vec{p})$  und Impuls  $\vec{p}$  auf der Teilchenseite mit den Größen Kreisfrequenz  $\omega(\vec{k})$  und Wellenvektor  $\vec{k}$  auf der Wellenseite durch die fundamentalen Beziehungen

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

verknüpft. Dabei ist

$$\hbar = 1.054572\dots \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 6.582\dots \cdot 10^{-22} \text{ MeV s}.$$

das Planck'sche Wirkungsquantum (Energie mal Zeit, mit  $\hbar = h/(2\pi)$ ).

- $E = \hbar\omega$ : dass Licht aus Energiequanten (Photonen) besteht, folgt u.A. aus den Eigenschaften der Hohlraumstrahlung, sowie aus dem photoelektrischen Effekt.
- $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ : Die Verknüpfung von Impuls mit dem Wellenvektor kann aus dem Compton Effekt abgeleitet werden.

Ausgehend von dieser Einsicht läßt sich die *Schrödinger-Gleichung* ableiten, was wir im Folgenden tun werden.

### 1.1 Wellenpakete

Wellen werden (wie in der Optik) in der Quantenmechanik mittels komplexer Zahlen beschrieben.

#### Ebene Wellen

Ebene Wellen  $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{x}, t)$  sind wie in der Elektrodynamik durch

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = A(\vec{k}) e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$$

$$A(\vec{k}) \quad : \quad \text{Amplitude}$$

$$\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x} \quad : \quad \text{Phase}$$

definiert. Falls  $|A| = [(\Re A)^2 + (\Im A)^2]^{\frac{1}{2}} \neq 0$ , so ist die Welle überall im Raum vorhanden.

### Wellenpakete

Räumlich begrenzte Wellenzüge, sog. *Wellenpakete*, entstehen durch Überlagerung von ebenen Wellen mit verschiedenen  $\vec{k}$  und  $\omega(\vec{k})$ .

### Überlagerung zweier ebenen Wellen

Als einfaches Beispiel für ein Wellenpaket betrachten wir die Überlagerung zweier ebenen Wellen.

Seien  $\psi_{\vec{k}_1}(\vec{x}, t)$  und  $\psi_{\vec{k}_2}(\vec{x}, t)$  zwei ebene Wellen mit nur wenig verschiedenen Wellenvektoren  $\vec{k}_i$ . Wir nehmen an, daß  $\vec{k}_i = (k_i, 0, 0)$ , die Ausbreitung also in  $x_1$ -Richtung stattfindet. Die Überlagerung (Superposition) der beiden Wellen ist

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = A_1 e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + A_2 e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)},$$

wobei wir  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$  verwendet haben. Es sei  $A_1 = A_2 = A$ . Ferner setzen wir:

$$\omega_1 = \bar{\omega} + \Delta\omega \quad , \quad \omega_2 = \bar{\omega} - \Delta\omega$$

$$k_1 = \bar{k} + \Delta k \quad , \quad k_2 = \bar{k} - \Delta k$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) &= A \left[ e^{-i[(\bar{\omega} + \Delta\omega)t - (\bar{k} + \Delta k)x]} + e^{-i[(\bar{\omega} - \Delta\omega)t - (\bar{k} - \Delta k)x]} \right] \\ &= A \left[ e^{-i(t\Delta\omega - x\Delta k)} + e^{+i(t\Delta\omega - x\Delta k)} \right] \cdot e^{-i(\bar{\omega}t - \bar{k}x)} \\ &= 2A \cos(t\Delta\omega - x\Delta k) e^{-i(\bar{\omega}t - \bar{k}x)}. \end{aligned}$$

Durch Superposition der ebenen Wellen  $\psi_{\vec{k}_1}, \psi_{\vec{k}_2}$  entsteht ein Wellenzug mit der mittleren Frequenz  $\bar{\omega}$ , dem Wellenvektor  $\bar{k}$  und der "modulierten" Amplitude  $\tilde{A} = 2A \cos(t\Delta\omega - x\Delta k)$ . Die neue Amplitude  $\tilde{A}$  ist eine Funktion von  $\vec{x}$  und  $t$ . Sie ist maximal für

$$t\Delta\omega - x\Delta k = n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

und verschwindet für

$$t\Delta\omega - x\Delta k = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

**Gruppengeschwindigkeit**

Die "Bewegung" des durch  $t\Delta\omega - x\Delta k = 0$  gegebenen Maximums von  $\tilde{A}$  ist durch

$$\tilde{x}(t) = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} t$$

charakterisiert. Im Limes  $\Delta k \rightarrow 0$  wird daraus

$$\tilde{x}(t) = \frac{\partial\omega}{\partial k} t,$$

oder, im 3 - dimensionalen Fall,

$$\tilde{\vec{x}} = \left( \text{grad}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \right) t$$

Das Maximum der superponierten Welle wandert also mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v}_g := \text{grad}_{\vec{k}} \omega(\vec{k})$$

durch den Raum. Man bezeichnet diese Geschwindigkeit als *Gruppengeschwindigkeit* des Wellenzuges (Wellenpaketes).

Wegen  $E = \hbar\omega$ ,  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  gilt

$$\vec{v}_g = \text{grad}_{\vec{p}} E(\vec{p}) = \vec{v}$$

Die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpaketes ist gleich der "mechanischen" Geschwindigkeit der zugeordneten Teilchen.

Man betrachte z.B.  $E(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2m)$ . Dies ist ein wichtiger Zusammenhang zwischen Wellen- und Teilcheneigenschaften.

**Phasengeschwindigkeit**

Die Ausbreitung der Wellenphase  $\bar{\omega}t - \bar{k}x$  ist durch  $\bar{\omega}t - \bar{k}x = \text{const.}$  charakterisiert und durch  $v_{\text{phase}} = \bar{\omega}/\bar{k}$  gegeben. Man bezeichnet sie mit *Phasengeschwindigkeit*. Wie wir von den Radiowellen wissen, findet die Übertragung der "Information" via der Modulation der Amplitude statt, die Information breitet sich also mit der Gruppengeschwindigkeit  $\vec{v}_g$  aus.

**Allgemeines Wellenpaket**

Im allgemeinen enthält ein Wellenzug (Wellenpaket) unendlich viele Frequenzen,

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3k g(\vec{k}) e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$$

was einer Fourier-Zerlegung mit (komplexen) Fourier-Komponenten  $g(\vec{k})$  entspricht. Letzter bestimmen, mit welchem Gewicht einzelne ebenen Wellen  $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t)$  an dem Wellenpaket beteiligt sind.

### 1.1.1 Gauß'sche Wellenpakete

Für eine Motivation der Unschärfe-Relation betrachten wir hier den eindimensionalen Fall.

#### Gauß'sches Wellenpaket für den eindimensionalen Fall

Die Funktion

$$g(k) = e^{-\alpha(k - k_0)^2}, \quad \alpha > 0$$

beschreibt eine Gauß'sche Verteilung, die bei  $k = k_0$  konzentriert ist. Die Breite  $\sigma$  der Verteilung ist durch den Parameter  $\alpha = 1/(2\sigma^2)$  charakterisiert. Das Wellenpaket lautet

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\alpha(k - k_0)^2} e^{-i(\omega(k)t - kx)}.$$

Die klassische  $E = p^2/(2m)$  und die relativistische  $E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$  Energie-Impuls Beziehungen für freie Teilchen führen jeweils zu

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2m} (\hbar k)^2 = \frac{\hbar}{2m} k^2 \\ \omega &= \frac{1}{\hbar} c \sqrt{(\hbar k)^2 + m^2 c^2} = c \left( k^2 + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

wobei wir  $E = \hbar\omega$  und  $p = \hbar k$  verwendet haben. Allgemein ist Entwicklung von  $\omega(k)$  um  $k = k_0$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots$$

Für das Gauß'sche Wellenpaket ist die Verteilung  $\omega(k)$  um  $k = k_0$  konzentriert, wir können also die Entwicklung nach dem zweiten Glied abbrechen (für  $\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2$  wäre dies exakt).

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} &= v_g \quad (\text{Gruppengeschwindigkeit}) \\ \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0} &\equiv \beta \quad \left( \rightarrow \frac{\hbar}{2m} \text{ für } \omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \right) \end{aligned}$$

Für das Wellenpaket ergibt sich damit

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\alpha(k - k_0)^2} e^{-i[\omega(k_0)t + v_g(k - k_0)t + \beta(k - k_0)^2 t - kx]}.$$

Wir führen die Variablen-Substitution  $\tilde{k} = k - k_0$  durch:

$$\psi(x, t) = e^{-i(\omega(k_0)t - k_0 x)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} e^{-\alpha\tilde{k}^2 - i\beta t \tilde{k}^2} e^{i\tilde{k}(x - v_g t)}.$$

Das Gauss'sche Integral ergibt (Übungen)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\gamma y^2} e^{-iuy} = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{4\gamma} u^2\right),$$

Diese Formel gilt auch für komplexe  $\gamma$ , falls  $\Re e\gamma > 0$ , so daß wir insgesamt zu folgendem Resultat gelangen:

$$\psi(x, t) = \left( \frac{\pi}{\alpha + i\beta t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4(\alpha + i\beta t)}(x - v_g t)^2} e^{-i(\omega(k_0)t - k_0 x)}$$

Das Wellenpaket  $\psi(x, t)$  ist eine Welle mit der Phase  $\omega(k_0)t - k_0 x$  und der ortsabhängigen Amplitude

$$A_G(x, t) = \left( \frac{\pi}{\alpha + i\beta t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4(\alpha + i\beta t)}(x - v_g t)^2}$$

$$|A_G(x, t)|^2 = A_G A_G^* = \left( \frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}}$$

Die Intensität  $|\psi(x, t)|^2 = |A_G|^2$  ist also wieder eine Gauß'sche Verteilung. Mit  $\sigma^2 = (\alpha^2 + \beta^2 t^2)$  wächst die Varianz  $\sigma$  mit der Zeit.

### **Gruppengeschwindigkeit**

Bei festem  $t$  ist  $|\psi(x, t)|^2$  maximal, falls  $x = v_g t$ , d.h. dort, wo sich nach der klassischen Mechanik ( $x(t) = vt$ ) das Teilchen befinden sollte. Das Maximum wandert mit der Geschwindigkeit  $v_g$ .

### **Unschärfe-Relation**

Für  $t = 0$  ist

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} \equiv \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}$$

was wir mit

$$|g(k)|^2 = e^{-2\alpha(k - k_0)^2} \equiv e^{-\frac{(k - k_0)^2}{2\sigma_k^2}}$$

in Verbindung setzen können. Wir definieren

$$\delta x(0) = \sqrt{2\alpha} \quad : \quad \text{Breite des Wellenpaketes im Ortsraum zur Zeit } t=0,$$

$$\delta k := 1/\sqrt{2\alpha} \quad : \quad \text{Breite des Gauß'schen Wellenpaketes im } k\text{-Raum}$$

denn, z.B. falls  $k - k_0 = \delta k$ , so ist  $|g(k)|^2$  auf den  $e$ -ten Teil abgefallen. Zwischen  $\delta x(0)$  und  $\delta k$  gilt die Beziehung

$$\delta k \delta x(0) = 1$$

Je schmaler also ein Wellenpaket im  $k$  - Raum ist (d.h. je schmaler die Spektrallinie ist), um so breiter ist das Wellenpaket im Ortsraum und umgekehrt.<sup>1</sup> Mit  $p = \hbar k$  folgt schlussendlich

$$\delta p \delta x(0) = \hbar$$

Je genauer man also den Impuls eines Teilchens kennt ("Unschärfe"  $\delta p$ ), desto weniger genau kann man seinen Ort  $x$  angeben ("Unschärfe"  $\delta x$ ). Das Produkt der Unschärfen ist durch  $\hbar$  gegeben was die Heisenberg'sche Unschärferelation definiert. Mehr hierzu später!

### Born'sche Interpretation

Die Unschärferelation gilt - wie wir sehen werden - für beliebige Wellenpakete. Sie bedeutet, daß die Wellenfunktion nicht die Materieverteilung eines Teilchens beschreiben kann, denn erfahrungsgemäß zerfließen Elektronen, Protonen und Atome nicht.

Nach *Born* ist  $|\psi(x, t)|^2$  vielmehr als Wahrscheinlichkeitsdichte zu interpretieren, wie wir weiter unten noch ausführlicher diskutieren werden.

## 1.2 Schrödinger - Gleichung

### 1.2.1 Herleitung für freie Teilchen

Mit  $E = \hbar\omega$  und  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  wird nimmt die ebene Welle  $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{x}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$  die Form

$$\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

an. Für ein nichtrelativistisches Teilchen hat man  $E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2$ . Mit

$$\partial_t \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = -\frac{i}{\hbar} E \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) \equiv \partial_j \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = \frac{i}{\hbar} p_j \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t)$$

folgt

$$\begin{aligned} \Delta \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) &\equiv (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2) \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\hbar^2} \vec{p}^2 \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

Also genügt  $\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t)$  der (partiellen) Differentialgleichung

$$i\hbar \partial_t \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t).$$

<sup>1</sup>Der Wert on der rechten Seite hängt von der Definition der Unschärfe ab. Verwendet man die Standardabweisungen  $\sigma_x = \sqrt{\alpha}$  und  $\sigma_k = 1/(2\sqrt{\alpha})$ , so erhält man  $\sigma_x \sigma_k = 1/2$ .

Analog gilt für das Integral<sup>2</sup>

$$\psi(\vec{x}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} t - \vec{p} \cdot \vec{x} \right)} d^3p$$

die *Schrödinger Gleichung*

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(\vec{x}, t)$$

für freie Teilchen.

### Superpositionsprinzip

Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung in den Zeit- und Ortskoordinaten. Die Linearität trägt dem für die Quantentheorie fundamentalen Superpositionsprinzip Rechnung:

Beschreiben  $\psi_1$  und  $\psi_2$  zwei quantentheoretisch mögliche physikalische Zustände, so beschreibt auch die lineare Superposition

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad c_i \in \mathbb{C},$$

einen möglichen physikalischen Zustand.

### Korrespondenzprinzip

Man erhält die freie Schrödinger-Gleichung formal, indem man in der Beziehung  $E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2$  folgende Zuordnungen macht:

$$E \rightarrow i\hbar\partial_t, \quad p_j \rightarrow \mathbf{P}_j := \frac{\hbar}{i} \partial_j,$$

sowie

$$\frac{1}{2m} \vec{p}^2 \rightarrow \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \equiv \mathbf{H}_0.$$

Die Differential-Operatoren  $i\hbar\partial_t$  und  $\mathbf{H}_0$  sind auf die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}, t)$  anzuwenden.

Aus  $E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2$  folgt dann die freie Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H}_0 \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(\vec{x}, t).$$

## 1.2.2 Teilchen in äußerem Potential

Ein klassisches Teilchen, das sich in einem Potential  $V(\vec{x})$  (unabhängig von  $t$  und  $\vec{p}$ ) befindet, besitzt die Gesamtenergie  $E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{x})$ . Die Verallgemeinerung des obigen freien Falles ist dann

$$E \rightarrow \mathbf{H} := \mathbf{H}_0 + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\vec{x})$$

<sup>2</sup>Der Faktor  $(2\pi\hbar)^{-3/2}$  ist Konvention.

Die zugehörige Schrödinger-Gleichung lautet folgerichtig:

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t)$$

Die Schrödinger-Gleichung *mit* Potential ist eine *lineare Differentialgleichung*, also gilt auch hier das Superpositionsprinzip. Umgekehrt folgt die Linearität der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen mit Wechselwirkung aus der Forderung nach Gültigkeit des Superpositionsprinzips für Wellenfunktionen.

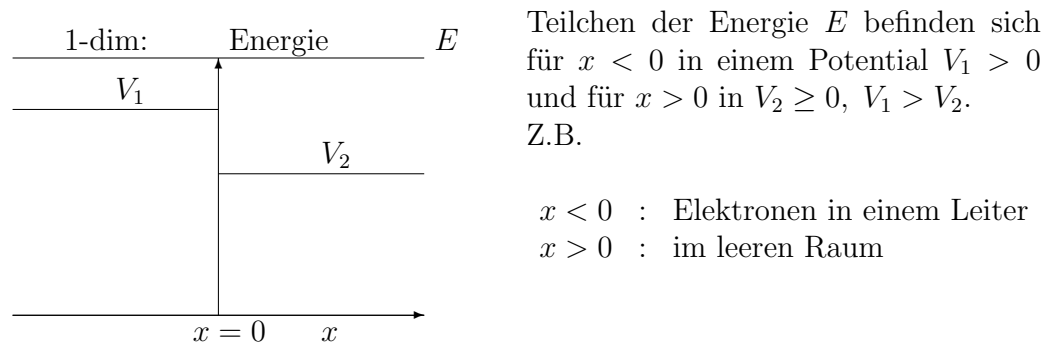
Man beachte, daß das Superpositionsprinzip in der Mechanik i.allg. *nicht* gilt, da die (Hamilton'schen) Bewegungsgleichungen i.allg. nicht linear sind.

### Plausibilitätsbetrachtung

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t)$$

für ein Teilchen in einem klassischen äußeren Potential  $V(\vec{x})$  kann man sich folgendermaßen plausibel machen:



In beiden Fällen,  $j = 1, 2$ , sind den Teilchenstrahlen ebene Wellen zugeordnet:

$$\psi_j = A_j e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_j x)}, \quad p_j = [2m(E - V_j)]^{\frac{1}{2}}$$

$$E = \frac{1}{2m} p_1^2 + V_1 = \frac{1}{2m} p_2^2 + V_2.$$

Für  $x < 0$  bzw.  $x > 0$  gelten jeweils die Gleichungen

$$i\hbar\partial_t \psi_1(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x, t) + V_1 \psi_1(x, t),$$

$$i\hbar\partial_t \psi_2(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x, t) + V_2 \psi_2(x, t).$$

Hat man nun  $n$  verschiedene Gebiete mit  $V_\nu = \text{const.}$ ;  $\nu = 1, \dots, n$ , mit  $V_{\nu_1} \neq V_{\nu_2}$ , so erhält man für jedes  $\nu$  eine entsprechende Gleichung wie oben. Eine naheliegende (aber



nicht zwingende) Verallgemeinerung für kontinuierliche  $V(x)$  ist dann:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(\vec{x})\right)\psi(x,t).$$

Die eigentliche Bestätigung der Schrödinger - Gleichung erhält man durch Vergleich mit experimentellen Resultaten.

### 1.2.3 Operatoren

Operatoren sind nichts anderes als Vorschriften, wie Elemente einer vorgegebenen Menge bestimmte Elemente einer anderen Menge (die gleich der ursprünglichen sein kann) zugeordnet werden. Ein anderer Name für derartige Vorschriften ist Abbildung.

#### Matrizen

Es sei  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$  eine feste Basis im  $\mathbb{R}^2$ . Man hat dann

$$\vec{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 \quad \leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathbf{x}.$$

Jede Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

definiert eindeutig eine Abbildung  $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  durch, die Vorschrift

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_A = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2.$$

Hier ist  $\mathbf{A}$  ein *Matrix - Operator*.

#### Beispiele für Operatoren

Es sei  $\mathcal{F} := \{f_1(x), \dots, f_n(x), x \in \mathbb{R}\}$  eine Menge von komplexwertigen Funktionen auf der reellen Achse, die bestimmte Eigenschaften haben. Z.B. seien die  $f_\nu(x)$  quadratintegrierbar:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |f_\nu(x)|^2 < \infty.$$

- Multiplikations-Operator

Die Vorschrift

$$f_\nu(x) \rightarrow x^2 f_\nu(x)$$

definiert den Multiplikations - Operator  $x^2$ . Man beachte, daß häufig  $x^2 f_\nu(x) \notin \mathcal{F}$ : so braucht z.B.  $x^2 f_\nu(x)$  nicht mehr quadratintegrierbar zu sein!

- Differential-Operator

Die Vorschrift

$$f_\nu(x) \rightarrow \frac{d}{dx} f_\nu(x),$$

definiert den *Differential-Operator*  $\frac{d}{dx}$ , falls  $f_\nu \in C^1$  (d.h. die Menge der 1-mal stetig differenzierbaren Funktionen). Auch hier stimmt die Bildmenge nicht notwendigerweise mit der Urbildmenge  $C^1$  überein!

- Komplexe-Konjugation

Die Vorschrift

$$f_\nu(x) \rightarrow f_\nu^*(x)$$

definiert den Operator der Komplexe Konjugation  $\mathbf{K}$ .

### Anmerkungen

1. Definitions- und Wertebereich

Diese Beispiele zeigen, daß es bei einem Operator wesentlich ist, die zugehörige

- Urbild-Menge = Definitionsbereich
- Bild-Menge = Wertebereich

anzugeben.

2. Lineare Operatoren

Der Matrix-Operator  $\mathbf{A}$  ist ein linearer Operator. Mit

$$\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in \mathbb{R}^2, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}, \quad \lambda_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 \mathbf{x}^{(2)} \in \mathbb{R}^2$$

gilt

$$\mathbf{A} \cdot (\lambda_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 \mathbf{x}^{(2)}) = \lambda_1 (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(1)}) + \lambda_2 (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(2)}).$$

Der Differential-Operator ist gleichfalls linear. Mit

$$f_1(x), f_2(x) \in C^1, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

gilt

$$\frac{d}{dx} (\lambda_1 f_1(x) + \lambda_2 f_2(x)) = \lambda_1 \frac{d}{dx} f_1(x) + \lambda_2 \frac{d}{dx} f_2(x).$$

3. Antilineare Operatoren

Andererseits gilt für die komplexe Konjugation  $\mathbf{K}$ :

$$\mathbf{K} (\lambda_1 f_1(x) + \lambda_2 f_2(x)) = \lambda_1^* \mathbf{K} f_1(x) + \lambda_2^* \mathbf{K} f_2(x),$$

d.h.  $\mathbf{K}$  ist nicht linear. Man nennt  $\mathbf{K}$  antilinear.

4. Vertauschungsrelationen

Operatoren vertauschen im allgemeinen nicht miteinander. Seien z.B.  $\mathbf{A}_1$  und  $\mathbf{A}_2$  zwei Matrizen, so gilt i.a.

$$\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \neq \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_1, \quad [\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2] \equiv \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 - \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_1 \neq 0.$$

Man nennt  $[\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2]$  den *Kommutator* von  $\mathbf{A}_1$  mit  $\mathbf{A}_2$ . Ferner hat man

$$\frac{d}{dx} (xf(x)) = f(x) + x \left( \frac{d}{dx} f(x) \right), \quad \frac{d}{dx} (xf(x)) - x \left( \frac{d}{dx} f(x) \right) = f(x).$$

Das bedeutet

$$\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} = \left[ \frac{d}{dx}, x \right] = \mathbf{1},$$

wobei  $\mathbf{1}$  der Identitätsoperator (die Einheitsmatrix) ist.

5. Skalarprodukt

In jedem komplex-wertigen Vektorraum mit

$$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{C}^N, \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N), \quad \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N),$$

läßt sich das *Skalarprodukt*

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \sum_i x_i^* y_i, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \sum_i x_i^* x_i \equiv |\mathbf{x}|^2$$

definieren. Man bezeichnet  $|\mathbf{x}|$  als die *Norm* des Vektors  $\mathbf{x}$ . Sei  $A$  eine  $N \times N$  matrix, dann gilt

$$(\mathbf{x}, A\mathbf{y}) = \sum_i x_i^* A_{ij} y_i.$$

1.2.4 Das KorrespondenzprinzipOrtsoperatoren

Der lineare Multiplikations-Operatoren

$$\mathbf{Q}_j : \quad \mathbf{Q}_j \psi = x_j \psi, \quad j = 1, 2, 3$$

wird *Ortsoperator* genannt.

Impulsoperator

Der linearen Differential-Operator

$$\mathbf{P}_j : \quad \mathbf{P}_j \psi = \frac{\hbar}{i} \partial_j \psi, \quad j = 1, 2, 3$$

wird *Impulsoperator* genannt.

Linearität des Schrödinger-Operators

Der Schrödinger-Operator

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\vec{x})$$

ist ein linearer Operator im Raum der Wellenfunktionen  $\psi(\vec{x}, t)$ . Er ist mit

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}) = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 + V(\vec{\mathbf{Q}})$$

eine Funktion des Orts- und des Impulsoperators.

Vertauschungs-Relationen

Die Operatoren  $\mathbf{P}_j$  und  $\mathbf{Q}_k$  genügen den *Vertauschungs-Relationen*:

$$\mathbf{P}_j \mathbf{Q}_k - \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_j = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}$$

$$\mathbf{P}_j (\mathbf{Q}_k \psi) - \mathbf{Q}_k (\mathbf{P}_j \psi) = \begin{cases} \frac{\hbar}{i} \psi & \text{für } j = k \\ 0 & \text{für } j \neq k. \end{cases}$$

Weitere Eigenschaften der Operatoren  $\mathbf{H}, \vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}$  etc. werden später diskutiert.

### Hamilton-Operator

Der Schrödinger Operator ist eine Funktion von Impuls und Ort, genau wie die Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik. Daher wird er auch *Hamilton-Operator* genannt.

### Korrespondenzprinzip

Der Übergang von der Hamilton-Mechanik zur Quantenmechanik bezeichnet man auch als *Quantisierung*. Dabei geht man von den “kanonisch konjugierten” Variablen  $q_i$  und  $p_i$  (Ort und Impuls) der Hamilton-Mechanik aus. Es gelten die folgende Äquivalenzen:

	<u>Mechanik</u>	<u>Quantenmechanik</u>
1.	Phasenraum	Hilbertraum
2.	$A(q_i, p_i)$	Operator $\hat{A}$
4.	Hamiltonfunktion $H$	Hamiltonoperator $\hat{H}$
5.	$q_i, p_i$	Operatoren $\hat{q}_i, \hat{p}_i$
6.	$\{A, B\}$	Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
7.	$\{q_i, p_j\} = 0$	$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$
8.	$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}$	$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A} = i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{A}, \hat{H}]$

Dabei bezeichnet

$$\{\varphi, \psi\} = \sum_i \left( \frac{\partial \varphi}{\partial q_i} \frac{\partial \psi}{\partial p_i} - \frac{\partial \varphi}{\partial p_i} \frac{\partial \psi}{\partial q_i} \right)$$

die *Poisson-Klammer*  $\{\varphi, \psi\}$ . Die obrige Tabelle beschreibt das sogenannte “Korrespondenzprinzip”. Insbesondere sieht man aus Punkt 7. und 8., dass der klassische Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  erfüllt ist.

## 1.3 Zur Interpretation der Wellenfunktion

Es sei klassisch  $E = \frac{1}{2}\vec{p}^2 + V_0$ , mit  $V_0 = \text{const.}$  Da die Normierung der Energie (d.h.  $V_0$ ) willkürlich ist, kann die Frequenz  $\omega = E/\hbar$  selbst keine physikalische Bedeutung haben, wohl aber Differenzen, wie  $\omega_{12} = (E_2 - E_1)/\hbar$ .

### 1.3.1 Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}, t)$  ist folgendermaßen zu verstehen

Die Größe

$$w(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$$

ist eine *Wahrscheinlichkeitsdichte*. Die Wahrscheinlichkeit  $w(G, t)$  ein Teilchen zur Zeit  $t$  im Gebiet  $G \subset \mathbb{R}^3$  zu finden, ist entsprechend durch

$$w(G, t) = \int_G d^3x w(\vec{x}, t)$$

gegeben.

### Normierung

Da das Teilchen irgendwo sein muß, muss die Wellenfunktion normiert sein:

$$w(\mathbb{R}^3, t) = 1$$

Dies ist eine zusätzliche Bedingung an die Lösungen der Schrödinger-Gleichung: Es sind nur quadrat-integrable Lösungen zugelassen,

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi|^2 < \infty$$

Diese Normierung läßt sich i.A. durch eine einfache Reskalierung der Wellenfunktion erreichen. Falls

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi|^2 = N^2 < \infty$$

so ist mit  $\psi(\vec{x}, t)$  auch

$$\frac{1}{|N|} \psi(\vec{x}, t)$$

eine Lösung der Schrödinger - Gleichung, da diese linear ist. Also läßt sich durch Umnormierung immer  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi|^2 = 1$  erreichen.

### Normierung von Gauß'schen Wellenpaketen

In Abschnitt 1.1.1 haben wir eindimensionale Gauß'sche Wellenpakete behandelt. In drei Dimensionen gilt analog:

$$\psi_G(\vec{x}, t) \approx A_G(\vec{x}, t) e^{-i(\omega t - \vec{x} \cdot \vec{k})}, \quad |A_G(\vec{x}, t=0)|^2 = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^3 e^{-\vec{x}^2/(2\alpha)},$$

wenn wir uns für die Normierung zunächst auf  $t = 0$  beschränken. Aus  $\int dy e^{-y^2/(2\alpha)} = \sqrt{2\pi\alpha}$  folgt

$$\int d^3x |A_G(\vec{x}, t=0)|^2 = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^3 (2\pi\alpha)^{\frac{3}{2}} = N^2$$

für die Norm. Demnach erhält man

$$\begin{aligned} \psi_G(\vec{x}, t=0) &= (2\pi\alpha)^{-3/4} e^{-\vec{x}^2/(4\alpha)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ w(\vec{x}, t=0) &= (2\pi\alpha)^{-3/2} e^{-\vec{x}^2/(2\alpha)} \end{aligned}$$

für das normierte Wellenpaket, mit

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t=0) = 1 .$$

Für allgemeine Zeiten  $t$  folgt die Normierung aus der Kontinuitätsgleichung.

### 1.3.2 Kontinuitätsgleichung

Falls die Schrödinger-Gleichung physikalisch sinnvoll sein soll, dann muss die Normierung der Wellenfunktion eine Konstante der Bewegung sein. Aus

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t=0) = 1$$

muss

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t) = 1$$

für alle Zeiten folgern.

#### Kontinuitätsgleichung

Zunächst gilt

$$\partial_t w(\vec{x}, t) = \partial_t (\psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)) = (\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* (\partial_t \psi) .$$

Die Schrödinger-Gleichung für  $\psi$  und für  $\psi^*$  ergibt:

$$\partial_t \psi = \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V \right) \psi, \quad \partial_t \psi^* = -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V \right) \psi^* ,$$

da das Potential  $V$  reell ist. Hieraus folgt

$$\partial_t w(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - (\Delta \psi^*) \psi) .$$

Nun gilt allgemein

$$f_1 \Delta f_2 - f_2 \Delta f_1 = \operatorname{div} (f_1 \operatorname{grad} f_2 - f_2 \operatorname{grad} f_1) ,$$

so daß wir mit der Definition

$$\vec{s} := \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*)$$

für die *Wahrscheinlichkeits-Strome-Dichte*  $\vec{s}$  die *Kontinuitätsgleichung*

$$\partial_t w(\vec{x}, t) + \operatorname{div} \vec{s}(\vec{x}, t) = 0$$

erhalten, mit

$$\begin{aligned} w(\vec{x}, t) &= |\psi(\vec{x}, t)|^2 \\ \vec{s}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*)(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

Es gilt also:

Reelle Wellenfunktionen können keinen Strom transportieren.

Kontinuitätsgleichungen gibt es überall dann in der Physik, wenn es dynamische Erhaltungsgrößen gibt, wie die Anzahl Teilen oder, wie hier, die Normierung.<sup>3</sup>

### **Erhaltung der Normierung**

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt die Erhaltung der Normierung. Bezeichnen wir mit  $K(a)$  eine Vollkugel vom Radius  $a$  und mit  $\partial K(a)$  ihre Oberfläche, so erhalten wir unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung und des Gauß'schen Satzes:<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \partial_t \int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \partial_t w(\vec{x}, t) = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \operatorname{div} \vec{s}(\vec{x}, t) \\ &= - \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{\partial K(a)} d^2 \vec{f} \cdot \vec{s}(\vec{x}, t), \end{aligned}$$

wobei  $d^2 \vec{f}$  das gerichtete Oberflächenelement ist. Wir transformieren auf Kugelkoordinaten:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t) = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega w(\vec{x}, t), \quad r = |\vec{x}|.$$

Die Normierbarkeit  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x w(\vec{x}, t) < \infty$  ist gewährleistet, falls

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int d\Omega w(\vec{x}, t) \sim \frac{1}{|\vec{x}|^{3+\epsilon}}, \quad \epsilon > 0,$$

bzw.

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\psi(\vec{x}, t)| \sim \frac{1}{|\vec{x}|^{3/2+\epsilon}}.$$

Hieraus folgt<sup>5</sup>

$$|\operatorname{grad} \psi| \sim \frac{1}{|\vec{x}|^{3/2+\epsilon}}, \quad |\vec{s}(\vec{x}, t)| \sim \frac{1}{r^{3+\epsilon}}.$$

<sup>3</sup>Die allgemeine Form ist  $\dot{\rho} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ , mit (Teilchen-) Dichte  $\rho = \rho(\vec{x}, t)$  und Stromdichte  $\vec{j} = \vec{j}(\vec{x}, t)$ .

<sup>4</sup>Nach dem Satz von Gauss ist das Integral über ein gegebenes Volumen von der Divergenz  $\nabla \cdot \vec{s}$  eines Vektorfeldes gleich dem Integral über die entsprechende Oberfläche vom Vektorfeld  $\vec{s}$  selbst.

<sup>5</sup>Für den rotations-symmetrischen Fall hat man  $\psi = 1/|\vec{x}|^\alpha$ , mit  $\operatorname{grad} \psi = -\vec{x}/|\vec{x}|^{\alpha+1}$ , also  $|\operatorname{grad} \psi| = 1/|\vec{x}|^\alpha$ , was aus  $|\vec{x}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  folgt.

Das heißt wiederum

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \int_{\partial K(a)} d^2 \vec{f} \cdot \vec{s}(\vec{x}, t) = 0$$

und somit

$$\partial_t \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x w(\vec{x}, t) = 0,$$

was es zu beweisen galt

### Gauß'sches Wellenpaket

Für ein Gauß'sches Wellenpaket <sup>6</sup>

$$\psi_G(\vec{x}, t=0) = (2\pi\alpha)^{-3/4} e^{-\vec{x}^2/(4\alpha)} e^{i \vec{p}_0 \cdot \vec{x}/\hbar}$$

erhält man

$$\vec{s}(\vec{x}, t=0) = \frac{\vec{p}_0}{m} w(\vec{x}, t=0) = \vec{v}_g w(\vec{x}, t=0)$$

für die Wahrscheinlichkeits-Stromdichte  $\vec{s} = (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \hbar / (2mi)$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte wird also mit der Gruppengeschwindigkeit  $\vec{v}_g$  transportiert.

- Reelle Faktoren, wie  $\exp(-\vec{x}^2/(4\alpha))$ , tragen nicht zur Stromdichte bei.
- Der Zusammenhang  
–*Stromdichte ist gleich Geschwindigkeit mal Teilchendichte*–  
gilt allgemein.<sup>7</sup>

### 1.3.3 Impulsraum

Für eine ebene Welle

$$\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x}, t) = A e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})/\hbar}, \quad A = \text{const.},$$

hat die Wahrscheinlichkeitsdichte  $w(\vec{x}, t)$  und die Stromdichte  $\vec{s}(\vec{x}, t)$  die Form

$$\begin{aligned} w(\vec{x}, t) &= |A|^2 = \text{const.}, \\ \vec{s}(\vec{x}, t) &= \frac{\vec{p}}{m} |A|^2; \end{aligned}$$

d.h. die Kontinuitätsgleichung  $\partial_t w + \text{div } \vec{s} = 0$  ist erfüllt, die Wellenfunktion aber nicht normierbar:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x w(\vec{x}, t) = |A|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \rightarrow \infty.$$

Ebene Wellen erstrecken sich bis ins Unendliche. Mehr hierzu später.

<sup>6</sup>Zur Erinnerung, die normierte Normalverteilung ist  $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$

<sup>7</sup>Die elektrische Stromdichte in einem Draht ist durch  $\vec{j} = q \vec{v} \rho$  gegeben, wobei  $q$ ,  $\vec{v}$ ,  $\rho$  Ladung, Geschwindigkeit, Dichte der Elektronen sind.



**Fourierintegrale**

Ist  $\psi(\vec{x}, t)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (allgemeine, d.h. mit Potential  $V(\vec{x})$ ), so können wir bezüglich  $\vec{x}$  Fourier-transformieren:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

Die Umkehr-Funktion ist

$$\tilde{\psi}(\vec{k}, t) := \int d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}},$$

denn

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) &= \int d^3x e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}', t) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \\ &= \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d^3x e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}}}_{(2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}')} \tilde{\psi}(\vec{k}', t), \end{aligned}$$

wobei sich  $\int dx e^{-iqx} = (2\pi)\delta(q)$  durch einen Grenzübergang beweisen lässt.<sup>8</sup>

**Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum**

Setzen wir die Fourierdarstellung für  $\psi(\vec{x}, t)$  in die Normierungsbedingung

$$\int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = 1$$

ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \int d^3x \left( \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right)^*, \end{aligned}$$

also

$$1 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \tilde{\psi}^*(\vec{k}, t)$$

Damit kann man, analog zu  $w(\vec{x}, t)$ , die Grösse

$$\tilde{w}(\vec{k}, t) = |\tilde{\psi}(\vec{k}, t)|^2$$

als *Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum* interpretieren.

Bemerkung:  $\tilde{w}(\vec{k}, t)$  ist nicht die Fourier-Transformierte von  $w(\vec{x}, t)$ .

<sup>8</sup>Man betrachte den Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  von  $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iqx - \epsilon|x|} = 2\epsilon/(q^2 + \epsilon^2)$ , welches zu  $2\pi\delta(q)$  wird.

### 1.3.4 Erwartungswerte

Es seien  $a_1, a_2, \dots$  die möglichen Meßwerte einer Größe  $A$ . Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert  $a_\nu$  zu finden, sei  $w_\nu$ , wobei  $\sum_\nu w_\nu = 1$ . Dann definiert man als *Mittel- bzw. Erwartungswert von  $A$*  die Zahl

$$\bar{A} \equiv \langle A \rangle = \sum_{\nu=1} a_\nu w_\nu$$

Analog definiert man als Erwartungswert (zur Zeit  $t$ ) der Ortskoordinate  $x_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  :

$$\langle \mathbf{Q}_j \rangle (t) = \int d^3x x_j w(\vec{x}, t)$$

#### Impulsoperator

Der Erwartungswert des Impulsoperators ist via

$$\langle \vec{\mathbf{P}} \rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \vec{k} \tilde{w}(\vec{k}, t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \left( \frac{\hbar \nabla_x}{i} \right) \psi(\vec{x}, t)$$

sowohl im Impuls- wie im Ortsraum definiert, denn

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{P}} \rangle &= \int d^3x \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}^*(\vec{k}', t) e^{-i \vec{k}' \cdot \vec{x}} \left( \frac{\hbar \nabla_x}{i} \right) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \vec{k} \underbrace{\int d^3x e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}}}_{(2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}')} \tilde{\psi}^*(\vec{k}', t) \tilde{\psi}(\vec{k}, t) . \end{aligned}$$

#### Allgemeine Basis

Allgemein können wir im Funktionenraum eine orthogonal Basis  $\varphi_\nu(\vec{x})$  wählen, so dass

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{x}), \quad \int d^3x \varphi_n^*(\vec{x}) \varphi_m(\vec{x}) = \delta_{n,m} .$$

Beispiele für die  $\varphi_n(\vec{x})$  sind ebene Wellen und Kugelfunktionen, später Näheres hierzu. Der Erwartungswert  $\bar{A}$  lässt sich dann als

$$\bar{A} = \sum_\nu a_\nu w_n = \sum_\nu a_\nu |c_\nu|^2 ,$$

schreiben, denn  $c_\nu^2$  entspricht der Wahrscheinlichkeit das Teilchen  $\psi(\vec{x})$  im Zustand  $\varphi_\nu(\vec{x})$  zu finden. Die Voraussetzung für diese Beziehung ist allerdings, dass die nicht-diagonalen Matrixelemente  $\int d^3x \varphi_n^*(\vec{x}) A \varphi_m(\vec{x})$  verschwinden, also für  $n \neq m$ . Auch hierzu Näheres später.

#### Schwankungsquadrate

Bei Wahrscheinlichkeits-Aussagen ist nicht nur der Mittelwert wichtig, sondern auch die mittlere Abweichung hiervon.

Hat  $A$  die Meßwerte  $a_1, a_2, \dots$  und den Mittelwert  $\langle A \rangle$ , so definiert man als *mittleres Schwankungsquadrat*  $(\Delta A)^2$ ,  $\Delta A = \sqrt{(\Delta A)^2}$  die Größe

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \sum_{\nu=1}^n (a_{\nu} - \langle A \rangle)^2 w_{\nu} \\ &= \sum_{\nu=1}^n (a_{\nu}^2 - 2 \langle A \rangle a_{\nu} + \langle A \rangle^2) w_{\nu} \\ &= \sum_{\nu=1}^n a_{\nu}^2 w_{\nu} - \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Das ist der übliche Ausdruck für die Varianz.

### Heisenberg'sche Unschärfe-Relation

Zwischen der Varianz des Impulses und des Ortes,  $\Delta p_j$  und  $\Delta x_j$ , besteht die *Heisenberg'sche Unschärfe-Relation*,

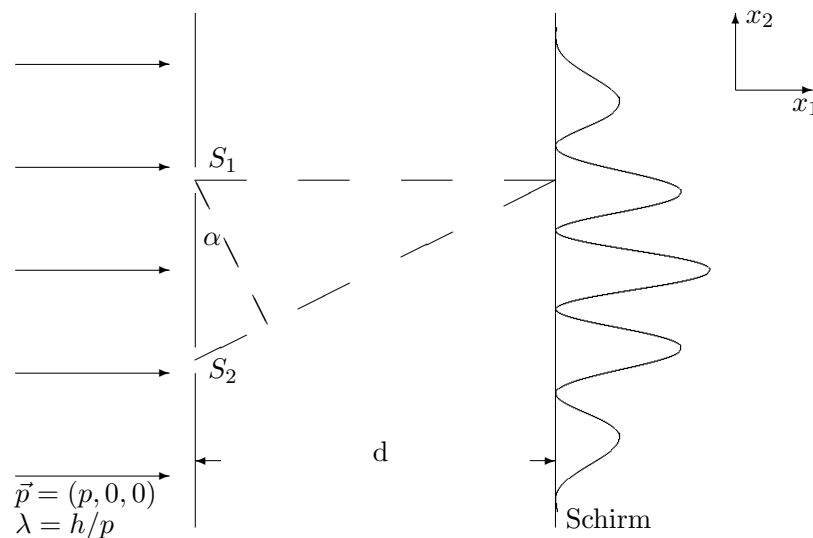
$$(\Delta x_j) \cdot (\Delta p_j) \geq \frac{1}{2} \hbar$$

welche wir später allg. beweisen werden. Bei einem quantenmechanischen System lassen sich Orts- und Impulsvariable also nie gleichzeitig beliebig scharf messen. Dem Produkt der Unschärfen ist durch die Relation  $(\Delta x_j) \cdot (\Delta p_j) \geq \hbar/2$  eine untere Schranke gesetzt.

## 1.3.5 Beugung und Interferenz

### Doppelspaltexperiment

Wir betrachten nun die Interpretation eines Experiments, bei welchem ein monochromatischer Elektronenstrahl auf zwei Spalten auftritt:



Von links fällt eine ebene Welle mit Frequenz  $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{1}{2m} \vec{p}^2 \right)$  und Wellenvektor  $\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}$  auf eine Blende mit den Spalten  $S_1$  und  $S_2$ , die sich im Abstand  $a$  voneinander befinden. Die Spalten sind kohärente Quellen für die Kugelwellen<sup>9</sup>

$$A_1 \frac{e^{-i(\omega t - k|\vec{x} - \vec{a}/2|)}}{|\vec{x} - \vec{a}/2|}, \quad A_2 \frac{e^{-i(\omega t - k|\vec{x} + \vec{a}/2|)}}{|\vec{x} + \vec{a}/2|}, \quad k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda},$$

die sich hinter der Blende überlagern:

$$\psi(\vec{x}, t) = A_1 \frac{e^{-i(\omega t - k|\vec{x} - \vec{a}/2|)}}{|\vec{x} - \vec{a}/2|} + A_2 \frac{e^{-i(\omega t - k|\vec{x} + \vec{a}/2|)}}{|\vec{x} + \vec{a}/2|}.$$

Die zugehörige Intensität (unnormierte Wahrscheinlichkeitsdichte) ist

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{|A_1|^2}{(|\vec{x} - \vec{a}/2|)^2} + \frac{|A_2|^2}{(|\vec{x} + \vec{a}/2|)^2} + \Re e \left( \frac{2A_1 A_2^* e^{ik(|\vec{x} - \vec{a}/2| - |\vec{x} + \vec{a}/2|)}}{|\vec{x} - \vec{a}/2| |\vec{x} + \vec{a}/2|} \right)$$

Der letzte Term ist für die Interferenzen auf dem Schirm verantwortlich, welche als Funktion der Gangdifferenz  $\Delta x = |\vec{x} - \vec{a}/2| - |\vec{x} + \vec{a}/2|$  auftreten. Letzter lässt sich via  $\Delta x = a \sin \alpha$  durch den Winkel  $\alpha$  (siehe Abbildung) ausdrücken.

### Wellen-Bild

Die Interferenz-Maxima treten beim Doppelspaltexperiment auf wenn die Gangdifferenz  $\Delta x$  ein Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/k$  ist, also wenn

$$a \sin \alpha_n = n\lambda$$

gilt. Die Abstände der Maxima betragen auf dem Schirm

$$d \sin \alpha_{n+1} - d \sin \alpha_n \approx \frac{d\lambda}{a}.$$

Hält man einen Spalt zu, so verschwindet das zugehörige  $A_i$  und ebenso das Interferenzbild.

### Ein-Teilchen Interferenz

Die Interferenz verschwindet nicht, wenn man die Intensität des einfallenden Elektronenstrahl so stark verringert, daß immer nur **ein einziges** Elektron gleichzeitig in der Apparatur ist. Für eine genügende Statistik ist die Messung dann natürlich viele Male zu wiederholen.

Einzelne Elektronen interferieren mit sich selber.

Dies ist für alle Materiewellen der Fall. Da Elementarteilchen vom selben Typus ununterscheidbar sind, ist diese Aussage für den Viel-Teilchen Fall zu spezifizieren.

<sup>9</sup>Für die Theorie von Kugelwellen verweisen wir auf die Elektrodynamik.

## 1.4 Ehrenfest Theorem

### 1.4.1 Hermitisch konjugierte Operatoren

Mit  $A^\dagger$  bezeichnet man den zu  $A$  hermitisch konjugierten Operator. In Matrix Notation transponiert man die Matrix und nimmt dann die komplex-konjugierte Werte

$$A \hat{=} A_{ij}, \quad (A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*.$$

Es folgt

$$(A\psi)^* = \psi^* A^\dagger$$

was sich in Matrix-Notation mit  $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots)$  einfach nachvollziehen lässt:

$$(A\psi)_i = \sum_k A_{ik} \psi_k, \quad ((A\psi)^*)_i = \sum_k A_{ik}^* \psi_k^* = \sum_k (A^\dagger)_{ki} \psi_k^* = (\psi^* A^\dagger)_i,$$

q.e.d. Angewandt auf die Schrödinger-Gleichung folgt

$$i\hbar \dot{\psi} = H\psi, \quad -i\hbar \dot{\psi}^* = \psi^* H^\dagger = \psi^* H,$$

letzteres da der Hamilton-Operator symmetrisch und reel is, und damit *selbst-adjungiert*, d.h. es gilt  $H = H^\dagger$ .

### 1.4.2 Bewegungsgleichung für Erwartungswerte

Die zeitliche Entwicklung von eines Erwartungswerts  $\langle A \rangle$  is durch

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3x \psi^* A \psi = \int d^3x \psi^* A (H \psi) - \int d^3x (\psi^* H) A \psi$$

gegeben. Für den ersten Term haben wir die Schrödinger Gleichung  $i\hbar \dot{\psi} = H\psi$  verwendet, und im zweiten Term die komplex-konjugierte Schrödinger Gleichung  $-i\hbar \dot{\psi}^* = \psi^* H$ . Hier haben wir angenommen, dass der Operator  $A$  selber nicht explizit von der Zeit abhängt. Sollte das der Fall sein, ergibt sich insgesamt

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

was man als *Ehrenfest Theorem* bezeichnet. Den Kommutator  $[A, H] = AH - HA$  hatten wir bereits eingeführt.

### 1.4.3 Quasiklassische Bewegung

Wir wenden das *Ehrenfest Theorem* auf den Impuls- und den Orts-Operator an. Für ein Teilchen in einem Zeit-unabhängigen Potential  $V(x)$  gilt

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad [p, H] = [p, V(x)], \quad [x, H] = [x, p^2]/2m,$$

da Operatoren mit sich selber vertauschen. Der erste Term ergibt

$$[p, H] = \frac{\hbar}{i} (\nabla_x V(x) - V(x) \nabla_x) = \frac{\hbar}{i} V',$$

während wir den zweiten Term mit Hilfe von  $[x, p] = i\hbar$  zu

$$[x, p^2] = xp^2 - p^2x = (xp - px + px)p - p^2x = i\hbar p + p[x, p] = 2i\hbar p$$

umformen. In das Ehrenfest Theorem eingesetzt finden wir

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \langle V' \rangle, \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle p \rangle,$$

was zusammen

$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle V' \rangle$
---

ergibt. Die Erwartungswerte von Operatoren gehorchen also den klassischen Bewegungsgleichungen. Dieses ist allerdings nicht verwunderlich, da die Schrödinger-Gleichung dem Korrespondenzprinzip genügt.