Kapitel 2

Die Schrödinger - Gleichung

Die in Kapitel 1 erwähnten Phänomene (und viele weitere!) 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

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

verknüpft. Ausgehend von Wellenvorgängen, kann man mit ihrer Hilfe zur *Schrödinger–Gleichung* kommen:

2.1 Wellenpaketen

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

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\vec{x},t) &= A(\vec{k})\, e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{x})} \ ; \\ A(\vec{k}) &: \text{Amplitude} \ , \\ \omega t - \vec{k}\cdot\vec{x} &: \text{Phase} \end{aligned}$$

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

Wellenpakete
Räumlich begrenzte Wellenzüge, sog. *Wellenpakete*, bekommt man 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.

Es seien $\psi_{\mathbf{k_1}}(\vec{x},t)$ und $\psi_{\mathbf{k_2}}(\vec{x},t)$ 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 stattfinde. Die Überlagerung (Superposition) der beiden Wellen ergibt:

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

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:

$$\begin{aligned} \omega_1 = \overline{\omega} + \Delta\omega \quad &, \quad \omega_2 = \overline{\omega} - \Delta\omega \;; \\ k_1 = \overline{k} + \Delta k \quad &, \quad k_2 = \overline{k} - \Delta k \;, \end{aligned}$$

und erhallten

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

Durch Superposition der ebenen Wellen $\psi_{\mathbf{k_1}}, \psi_{\mathbf{k_2}}$ ensteht ein Wellenzug, mit der mittleren Frequenz $\overline{\omega}$, dem Wellenvektor $\overline{k}$ und der moduliertenÄmplitude $\tilde{A} = 2A\cos(t\Delta\omega - x\Delta k)$. Die neue Amplitude $\tilde{A}$ ist eine Funktion von $\vec{x}$ und t. Sie ist maximal für $t\Delta\omega - x\Delta k = n\pi$; $n = 0, \pm 1, \cdots$ und verschwindet für $t\Delta\omega - x\Delta k = (2n+1)\frac{\pi}{2}$; $n = 0, \pm 1 \cdots$.

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 $\Delta k \to 0$ wird daraus

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

oder, im 3 - dimensionalen Fall,

$$\boxed{\tilde{\vec{x}} \;=\; \left(\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\, \omega(\vec{k})\right)\, t \;,}$$

d.h. ein Maximum der superponierten Welle wandert mit der Geschwindigkeit

$$\boxed{\vec{v}_g \;:=\; \mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\, \omega(\vec{k})}$$

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

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

$$\vec{v}_g = \mathrm{grad}_{\mathbf{p}}\, E(\vec{p}) = \vec{v}$$
Die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpaketes ist gleich der “mechanischen” Geschwindigkeit der zugeordneten Teilchen.

schreiben. 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 $\overline{\omega}t - \overline{k}x$ ist durch $\overline{\omega}t - \overline{k}x =$ const. charakterisiert und durch $v_{phase} = \overline{\omega}/\overline{k}$ 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:

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

Die (komplexwertige) Funktion $g(\vec{k})$ gibt an, mit welchem Gewicht die einzelnen ebenen Wellen $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{x},t)$ an dem Wellenpaket beteiligt sind.

Gauß’sches Wellenpaket für den eindimensionalen Fall

$$g(k) \;=\; e^{-\alpha(k-k_o)^2}\,, \qquad \alpha > 0\,.$$

Die Funktion $g(k)$ beschreibt eine Gauß’sche Verteilung, die bei $k = k_0$ konzentriert ist. Die Breite der Verteilung ist durch den Parameter α charakterisiert. Das Wellenpaket lautet

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

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

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

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

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

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).

$$\left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0} = v_g \qquad : \text{Gruppengeschwindigkeit}$$

$$\frac{1}{2}\left.\frac{d^2\omega}{dk^2}\right|_{k=k_0} = \beta = const. \quad \left(= \frac{\hbar}{2m} \text{ für } \omega = \frac{\hbar}{2m}k^2\right) .$$

Damit ergibt sich für ψ:

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

Mittels Variablen–Substitution : $\tilde{k} = k - k_0$ folgt:

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

Nun ist (Übungen)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-\gamma y^2} e^{-iuy} = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}\; e^{-\frac{1}{4\gamma}u^2} .$$

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

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} A_G(x,t) &= \left(\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4(\alpha+i\beta t)}(x - v_g t)^2} , \\ &\text{d.h.} \\ |A_G(x,t)|^2 = A_G A_G^* &= \left(\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2+\beta^2 t^2)}} . \end{aligned}}$$

Die Intensität $|\psi(x,t)|^2 = |A_G|^2$ ist also wieder eine Gauß'sche Verteilung:

Gruppengeschwindingkeit

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

$$|\psi(x,0)|^2 \;=\; \frac{\pi}{\alpha}\, e^{-\dfrac{x^2}{2\alpha}} \;.$$

Andererseits gilt

$$|g(k)|^2 \;=\; e^{-2\alpha(k-k_0)^2} \;=\; e^{-\left[\dfrac{k-k_0}{(2\alpha)^{-1/2}}\right]^2} \;.$$

Wir definieren

$\delta k := 1/\sqrt{2\alpha}$	:	Breite des Gauß'schen Wellenpaketes im k–Raum
$\delta x(0) = \sqrt{2\alpha}$	:	Breite des Wellenpaketes im Ortsraum zur Zeit t=0 ,

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 δk gilt die Beziehung

$$\boxed{\delta k\, \delta x(0) \;=\; 1\;.}$$

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. Und da $p = \hbar k$, so folgt daraus

$$\boxed{\delta p\, \delta x(0) \;=\; \hbar\;.}$$

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

Für $t \neq 0$ bekommt man statt $\sqrt{2\alpha}$ die zeitabhängige Breite $\sqrt{2\alpha}(1+\frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2})^{1/2} > \sqrt{2\alpha}$, d.h. das Wellenpaket "zerfließt" im Laufe der Zeit!

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.

Literatur zur Fourier–Transformation

1. M.J. Lighthill,
   Einführung in die Theorie der Fourier-Analysis;
   BI- Hochschultaschenbuch 139, Mannheim 1966.
   (Sehr elementar!)

2. F. Constantinescu,
Distributionen und ihre Anwendung in der Physik,
Teubner, Stuttgart 1974.
(Kap. 10: Fourier-Transformation)

3. M. Reed and B. Simon,
Fourier-Analysis, Selfadjointness (Methods of Modern Mathematical Physics, vol. II)
Academic Press, New York etc. 1975.
(Gute Darstellung im Rahmen *des* modernen mehrbändigen Werkes zur Mathematischen Physik!)

4. E. Hewitt and K. Stromberg,
Real and Abstract Analysis §§16 u. 21,
Springer-Verlag, Berlin etc. 1969.
(Mathematisch anspruchsvoll!)

2.2 Die Schrödinger - Gleichung

2.2.1 Herleitung für freie Teilchen

Mit $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ wird aus der ebenen Welle $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{x},t) = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

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

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

$$\begin{aligned} \partial_t\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x},t) &= -\frac{i}{\hbar}E\,\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x},t) \qquad \text{und} \\ \frac{\partial}{\partial x_j}\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x},t) \equiv \partial_j\,\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x},t) &= \frac{i}{\hbar}p_j\,\psi_{\mathbf{p}}(\vec{x},t) \ , \end{aligned}$$

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

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

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

Ganz analog gilt für das Integral [1]

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

die *Schrödinger Gleichung*

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

für freie Teilchen.

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

Beschreiben ψ_1 und ψ_2 zwei quantentheoretisch mögliche physikalische Zustände, so beschreibt auch die lineare Superpostion

$$c_1\,\psi_1 + c_2\,\psi_2, \qquad c_i \in \mathcal{C} \ ,$$

[1] Der Faktor $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ ist Konvention.

einen möglichen physikalischen Zustand.

Korrespondenzprinzip

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

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

und

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

Die Differential–Operatoren $i\hbar\partial_t$ und $\mathbf{H}_0$ sind auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ anzuwenden und aus $E = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}$ folgt dann die freieSSchrödinger–Gleichung:

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

2.2.2 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

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

und die zugehörige Schrödinger–Gleichung lautet:

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

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

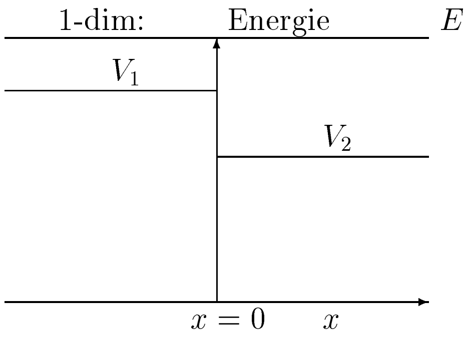
Man beachte, daß das Superpositionsprinzip in der Mechanik i.allg. *nicht* gilt, da die (Hamilton'schen) Bewegungsgleichungen i.allg. nicht linear sind!

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 so plausibel machen:



Teilchen der Energie E befinden sich für $x < 0$ in einem Potential $V_1 > 0$ und für $x > 0$ in $V_2 \geq 0$, $V_1 > V_2$. Z.B.

$$\begin{array}{lcl} x < 0 & : & \text{Elektronen in einem Leiter} \\ x > 0 & : & \text{im leeren Raum} \end{array}$$

In beiden Fällen sind den Teilchenstrahlen ebene Wellen zugeordnet:

$$\begin{aligned} \psi_j &= A_j \, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_j x)} , \; j = 1, 2, \\ \text{und} \quad p_j &= [2m(E - V_j)]^{\frac{1}{2}} , \\ \text{da} \quad E &= \frac{1}{2m} p_1^2 + V_1 \;=\; \frac{1}{2m} p_2^2 + V_2 \, . \end{aligned}$$

Für $x < 0$ bzw. $x > 0$ hat man offenbar die Gleichungen,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \, \psi_1(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \, \psi_1(x,t) + V_1 \, \psi_1(x,t) \qquad \text{bzw.} \\ i\hbar\partial_t \, \psi_2(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \, \psi_2(x,t) + V_2 \, \psi_2(x,t) \, . \end{aligned}$$

Hat man nun n verschiedene Gebiete mit $V_\nu = \text{const.}$; $\nu = 1, \ldots n, V_{\nu_1} \neq V_{\nu_2}$, so erhält man für jedes ν eine entsprechende Gleichung wie oben. Eine naheliegende (aber nicht zwingende) Verallgemeinerung für kontinuierliche $V(x)$ ist dann:

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

(s. auch Berkeley - Kurs, Bd. 4, Kap.7).

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

2.2.3 Operatoren

Operatoren sind nichts anderes als bestimmte 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

$$\vec{x} \;=\; x_1 \mathbf{e_1} + x_2 \mathbf{e_2} \qquad \leftrightarrow \qquad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \;=\; \mathbf{x} \, .$$

Jede Matrix

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

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

$$\mathbf{x} \to \mathbf{x_A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \qquad \text{für alle} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 .$$

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

Beispiele für Operatoren

Es sei $\mathcal{F} := \{f_1(x), \cdots, f_n(x),\ x \in \mathbb{R}\}$ 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
  $$f_\nu(x) \to x^2 f_\nu(x)$$
  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 quadratintegrabel zu sein!

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

- Komplexe-Konjugation
  Die Vorschrift
  $$f_\nu(x) \to f_\nu^*(x)$$
  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 und "Bild–Menge" = Wertebereich anzugeben .

2. Linear vs. antilinear

- Lineare Operatoren
  Der Matrix-Operator $\mathbf{A}$ ist ein linearer Operator. Mit
  $$\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in \mathbb{R}^2, \qquad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}, \qquad \lambda_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 \mathbf{x}^{(2)} \in \mathbb{R}^2$$
  gilt
  $$\boxed{\mathbf{A} \cdot \left(\lambda_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 \mathbf{x}^{(2)}\right) \;=\; \lambda_1 \left(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(1)}\right) + \lambda_2 \left(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(2)}\right) .}$$
  Der Differential-Operator ist gleichfalls linear. Mit
  $$f_1(x), f_2(x) \in C^1, \qquad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$
  gilt
  $$\frac{d}{dx}\left(\lambda_1 f_1(x) + \lambda_2 f_2(x)\right) \;=\; \lambda_1 \frac{d}{dx} f_1(x) + \lambda_2 \frac{d}{dx} f_2(x) \; .$$
- Antilineare Operatoren Andererseits gilt für die komplexe Konjugation $\mathbf{K}$:
  $$\mathbf{K}\left(\lambda_1 f_1(x) + \lambda_2 f_2(x)\right) \;=\; \lambda_1^* \, \mathbf{K} f_1(x) + \lambda_2^* \, \mathbf{K} f_2(x) \; ,$$
  d.h. $\mathbf{K}$ ist nicht linear. Man nennt $\mathbf{K}$ antilinear.

3. Vertauschungsrelationen
   Operatoren vertauschen im allgemeinen nicht miteinander. Seien z.B. $\mathbf{A}_1$ und $\mathbf{A}_2$ zwei Matrizen, so gilt i.a.
   $$\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \;\neq\; \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_1 \; , \qquad [\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2] \;\equiv\; \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \;-\; \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_1 \;\neq\; 0 \; .$$
   Man nennt $[\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2]$ den *Kommutator* von $\mathbf{A}_1$ mit $\mathbf{A}_2$.
   Ferner hat man
   $$\frac{d}{dx}\left(x f(x)\right) \;=\; f(x) + x\left(\frac{d}{dx} f(x)\right) \; , \qquad \frac{d}{dx}\left(x f(x)\right) \;-\; x\left(\frac{d}{dx} f(x)\right) \;=\; f(x) \; .$$
   Das bedeutet
   $$\boxed{\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} \;=\; \left[\frac{d}{dx}, x\right] \;=\; \mathbf{1} \; ,}$$
   wobei $\mathbf{1}$ der Idenditätsoperator (die Einheitsmatrix) ist.

4. Skalarprodukt
   In jedem komplex-wertigen Vektorraum mit
   $$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{C}^N, \qquad \mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N), \qquad \mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_N) \; ,$$
   läßt sich das *Skalarprodukt*
   $$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \;\equiv\; \sum_i x_i^* y_i, \qquad (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \;=\; \sum_i x_i^* x_i \;\equiv\; |\mathbf{x}|^2$$
   definieren. Man bezeichnet $|\mathbf{x}|$ als die *Norm* des Vektors $\mathbf{x}$. Sei A eine $N \times N$ matrix. Dann gilt
   $$(\mathbf{x}, A\mathbf{y}) \;=\; \sum_i x_i^* \, A_{ij} \, y_i \; .$$

2.2.4 Das Korrespondenzprinzip

Ortsoperators
Der lineare Multiplikations-Operatore

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

wird *Ortsoperator* genannt.

Impulsoperator
Der linearen Differential-Operator

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

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

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

eine Funktion des Orts- und des Impulsoperators.

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

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{P}_j \mathbf{Q}_k - \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_j \;&=\; \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \,, \text{d.h.} \\ \mathbf{P}_j \left(\mathbf{Q}_k \psi \right) - \mathbf{Q}_k \left(\mathbf{P}_j \psi \right) \;&=\; \begin{cases} \frac{\hbar}{i} \psi & \text{für} \quad j = k \\ \;0 & \text{für} \quad j \neq k \,. \end{cases} \end{aligned}}$$

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 konjungierten" Variablen q_i und p_i (Ort und Impuls) der Hamilton-Mechanik aus. Es gelten die folgende Äquivalenzen:

	Mechanik	**Quantenmechanik**
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 $\hbar \to 0$ erfüllt ist.

2.3 Zur Interpretation der Wellenfunktion

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

2.3.1 Wahrscheinlichkeitsdichte

Für die Wellenfunkion $\psi(\vec{x}, t)$ gilt nach Max Born folgende Interpretation:

Die Größe

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

ist als *Wahrscheinlichkeitsdichte* zu interpretieren:
Die Wahrscheinlichkeit $w(G, t)$ dafür, das Teilchen zur Zeit t im Gebiet $G \subset \mathbb{R}^3$ zu finden, ist gegeben durch

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

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

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

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

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

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 Wellenpakten

Nach Kap. 2.1 hat man für ein Gauß'sches Wellenpaket in drei Dimensionen

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

Mit $\int dy \, e^{-y^2/(2\alpha)} = \sqrt{2\pi\alpha}$ finden wir

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

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

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

2.3.2 Kontinuitätsgleichung

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

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

muss

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

für alle Zeiten folgern.

Kontinuitätsgleichung
Zunächst gilt

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

Die Schrödinger-Gleichung ergibt für ψ und für ψ^*:

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

da das Potential V reell ist. Hieraus folgt

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

Nun gilt allgemein

$$f_1\Delta f_2 - f_2\Delta f_1 \;=\; \mathrm{div}\,\Big(f_1\,\mathrm{grad}f_2 \;-\; f_2\,\mathrm{grad}f_1\Big)\ ,$$

so daß wir mit mit der Definition

$$\boxed{\vec{s} \;:=\; \frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*\,\mathrm{grad}\psi - \psi\,\mathrm{grad}\psi^*\Big)}$$

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

$$\boxed{\begin{aligned} &\partial_t\, w(\vec{x},t) \;+\; \mathrm{div}\,\vec{s}(\vec{x},t) \;=\; 0\,, \\[2ex] w(\vec{x},t) \;&=\; \Big|\psi(\vec{x},t)\Big|^2, \\ \vec{s}(\vec{x},t) \;&=\; \frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*\,\mathrm{grad}\psi - \psi\,\mathrm{grad}\psi^*\Big)(\vec{x},t)\,. \end{aligned}}$$

erhalten.

Erhaltung der Normierung
Aus der Kontinuitätgleichung 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 Kontinuitätgleichung und des Gauß'schen Satzes:

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

Wir transformieren auf Kugelkoordinaten:

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

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

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

bzw.

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

Hieraus folgt

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

Das heißt aber

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

und somit

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

was es zu beweisen galt

Gauß'sches Wellenpaket

Für ein Gauß'sches Wellenpaket

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

erhält man

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

Die Wahrscheinlichkeitsdichte wird also mit der Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_g$ transportiert.

2.3.3 Impulsraum

Für eine ebene Welle

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

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 $\partial_t w + \mathrm{div}\,\vec{s} = 0$ ist erfüllt, aber die Wellenfunktion aber nicht normierbar:

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

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

Fourierintegrale
Ist $\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödinger–Gleichung (mit Potential $V(\vec{x})$), so können wir bezüglich $\vec{x}$ Fourier–transformieren:

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

mit der Umkehrung

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

denn

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

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

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

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

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

als *Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum* interpretieren.
Bemerkung $\tilde{w}(\vec{k},t)$ ist nicht die Fourier - Transformierte von $w(\vec{x},t)$!

2.3.4 Erwartungswerte

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

$$\boxed{\overline{A} \ \equiv\ \langle A\rangle \ =\ \sum_{\nu=1} a_\nu w_\nu\ .}$$

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

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

Impulsoperator

Der Erwartungswerte des Impulsopertors lässt sich via

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

definieren, denn

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

Allgemeine Basis

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

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

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_ν^2 enspricht der Wahrscheinlichkeit das Teilchen $\psi(\vec{x})$ im Zustand $\varphi_\nu(\vec{x})$ zu finden.

Schwankungsquadrate

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

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

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

Heisenberg'sche Unschärfe–Relation

Zwischen der Varianz des Impulses und des Ortes, Δp_j und Δx_j, besteht die *Heisenberg'sche Unschärfe–Relation*,

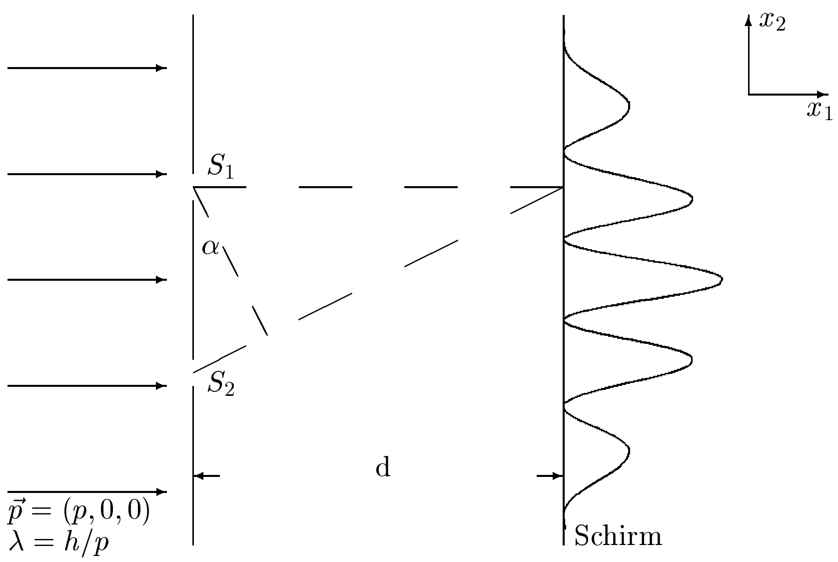
$$\boxed{(\Delta x_j) \cdot (\Delta p_j) \geq \frac{1}{2}\hbar\ ,}$$

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!

2.3.5 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 der Frequenz $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}\right)$, $\vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p}$ 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

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

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

$$\boxed{|\psi(\vec{x},t)|^2 = \frac{|A_1|^2}{(\vec{x}-\vec{a}/2)^2} + \frac{|A_2|^2}{(\vec{x}+\vec{a}/2)^2} + \Re e\left(\frac{2A_1A_2^*\, e^{ik(|\vec{x}-\vec{a}/2|-|\vec{x}+\vec{a}/2|)}}{|\vec{x}-\vec{a}/2|\,|\vec{x}+\vec{a}/2|}\right).}$$

Der letzte Term ist verantwortlich für die Interferenzen auf dem Schirm.

Wellen-Bild
Die Interferenz-Maxima treten beim Doppelspaltexeriment auf wenn die Gangdifferenz $\Delta x = a \sin\alpha$ ein Vielfachesder Wellenlänge λ ist, also für

$$\boxed{a \sin\alpha_n = n\lambda}$$

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 der Spalte zu, so verschwindet das zugehörige A_i und ebenso das Interferenzbild.

Teilchen-Bild
Verringert man die Intensität der einfallenden Elektronenstrahlen so, daß immer nur **ein** Elektron in der Apparatur ist, so findet man trotzdem (nach einiger Zeit) auf dem Schirm wieder ein Beugungsbild!!
Dennoch kann man die hereinkommenden Elektronen in der Ebene des Beugungsbildes zählen, indem man dort sehr viele Zähler aufbaut, von denen dann jeder einzelne auf je ein Elektron anspricht.

2.3.6 Quasiklassische Bewegung

Als Beispiel für die Berechnung von Erwartungswerten berechnen wir nun $\langle \vec{x} \rangle (t)$ und $\langle \vec{p} \rangle (t)$ für das Gauß'sche Wellenpaket

$$\hat{\psi}_G(\vec{p}) \;=\; \left(\frac{2\alpha}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha\,(\vec{p}-\vec{p}_0)^2/\,\hbar^2} \;.$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\psi_G(\vec{x},t) \;&=\; (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p\, \hat{\psi}_G(\vec{p})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}t - \vec{p}\cdot\vec{x}\right)} \\
&=\; \left(\frac{\alpha}{2\pi\left(\alpha + i\frac{\hbar}{2m}t\right)^2}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{1}{4}\left(\vec{x}-\frac{\vec{p}_0 t}{m}\right)^2 / \left(\alpha + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}\; e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}t - \vec{p}_0\cdot\vec{x}\right)} \;.
\end{aligned}$$

Weiter hat man

$$\begin{aligned}
w(\vec{x},t) \;&=\; \left(\frac{\alpha}{2\pi\gamma}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha\left(\vec{x}-\frac{\vec{p}_0 t}{m}\right)^2 / \,(2\gamma)} \;, \\
\gamma \;:=\; \gamma(t) \;&=\; \alpha^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2}t^2 \;.
\end{aligned}$$

Somit erhält man

$$\langle x_j \rangle (t) \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3x\, x_j \left(\frac{\alpha}{2\pi(\alpha^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2}t^2)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha\left(\vec{x}-\frac{\vec{p}_0}{m}t\right)^2}{2(\alpha^2+\frac{\hbar^2}{4m^2}t^2)}} \;.$$

Mit $\gamma(t) = \alpha^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2}t^2$ und der Variablen - Substitution $\vec{y} = \vec{x} - \frac{\vec{p}_0}{m}t$ ist

$$\langle x_j \rangle (t) \;=\; \left(\frac{\alpha}{2\pi\gamma(t)}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3y\, \left(y_j + \frac{1}{m}(p_0)_j t\right) e^{-\frac{\alpha\,\vec{y}^{\,2}}{2\gamma(t)}} \;.$$

Da der Term mit y_j eine ungerade Funktion in y_j ist, verschwindet er. Man erhält als Ergebnis:

$$\langle x_j \rangle (t) \;=\; \frac{1}{m}(p_0)_j t \int d^3x\, w(\vec{x},t) \;=\; \frac{1}{m}(p_0)_j t \;;$$

d.h.

$$\boxed{\left\langle \vec{\mathbf{Q}} \right\rangle (t) \;=\; \langle \vec{x} \rangle (t) \;=\; \frac{1}{m}\vec{p}_0\, t \;=\; \vec{v}_g t \;=\; \frac{1}{m}\left\langle \vec{\mathbf{P}} \right\rangle t \;.}$$

Die Erwartungswertungswerte von quantenmechanischen Operatoren gehorchen den klassischen Bewegungsgleichungen. Dieses ist allerding nicht verwunderlich, denn die Schrödinger-Gleichung gehorcht dem Korrespondenzprinzip.