

1. Induktive Begründung der Quantenmechanik:

Wellenfunktion & Schrödinger-Gleichung

1.1 Historisches

Ende des 19. Jhs. werden physikalische Phänomene mit zwei Theorien erklärt:

Newton'sche Mechanik \rightarrow Partikelchen

Maxwell'sche Elektrodynamik \rightarrow Felder (\rightarrow em. Wellen)

Sind Strahlung und Materie grundlegend verschiedene Dinge?

Ist die Physik nun abgeschlossen?

Die folgenden experimentellen und theoretischen Befunde beantworten diese Fragen mit Nein:

1.1.1 Planck'sche Strahlungsformel

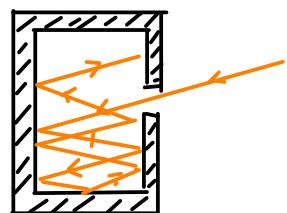
Idealisiertes Modell von thermischen Strahlungsquellen:

"Schwarzer Körper"

\rightarrow absorbiert sämtliche einfallende Strahlung (keine Reflexion)
unabhängig von der Wellenlänge

\rightarrow im Modell realisiert als Hohlraum:

(fasse dies z.B. als Struktur in der Oberfläche einer aufgeschwärzten Platte auf).



* Temperatur der Wand: T - im thermischen Gleichgewicht mit der Strahlung im Inneren.

* Energiedichte dieser Strahlung:

$$E = \frac{1}{2} (\vec{E} \cdot \vec{D} + \vec{H} \cdot \vec{B})$$

* spektrale Energiedichte: $u(\omega) = \frac{dE}{d\omega} \leftrightarrow E = \int_0^{\infty} d\omega u(\omega)$

mit Frequenz $\frac{\omega}{2\pi}$.

Dieses Spektrum soll mittels der durchs Loch entweichenden Strahlung beobachtet werden.

Empirisch gab Wien (1896) folgendes Gesetz an:

$$u(\omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} A e^{-g \frac{\omega}{T}} \text{ mit den Konstanten } A, g$$

Rayleigh (1900) liefert dagegen eine Formel für kleine ω her:

* Hohlraum sei Würfel der Kantenlänge a .

* \vec{E} -Feld verschwindet in den Wänden:

$$\rightarrow \vec{E} = \vec{\epsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x})$$

↳ Polarisationsvektor $\perp \vec{k}$ → 2 Polarisationen

$$\text{mit } k_i a = n_i \pi \quad n_i \in \{0, 1, 2, \dots\}$$

$$\text{Wellenlänge: } \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{2\pi c}{\omega} \iff |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$$

$$\rightarrow \omega = \frac{\pi c}{a} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

Zahl der Wellen mit Kreisfrequenz $\leq \omega$:

$$N(\omega) = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} |\vec{n}|^3 = \frac{a^3 \omega^3}{6\pi^2 c^3}$$

↳ nur „positiver Oktant“ des Kegel

$$dN(\omega) = \frac{a^3 \omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega$$

Gleichverteilungssatz → Energie pro Welle ist $k_B T$

$$\rightarrow u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T \quad \text{Rayleigh-Jeans-Gesetz}$$

(habe hier durchs Volumen a^3 dividiert und Faktor 2 für Polarisationszustände berücksichtigt)

Wir bemerken jedoch:

$$\int_0^\infty d\omega \omega u(\omega) = \infty \longrightarrow \text{"Ultraviolettkatastrophe"}$$

Dieses Problem führte dann Planck (1900) zu folgender Annahme:

Planck'sche Hypothese

Die Wände bestehen aus Oszillatoren, welche Energie nur in Vielfachen von $\hbar\omega$ abgeben / aufnehmen. Die Größe $\hbar = 2\pi k_B T$ hat die Einheit einer Wirkung und heißt Planck'sches Wirkungsquantum.

Gegensatz zur klassischen Physik: Energien können nur in quantisierten Portionen emittiert / absorbiert werden. Insbesondere ist die Energieportion proportional zur Frequenz.

Diese Hypothese führt zur Planck'schen Strahlungsformel (genauere Herleitung in der statistischen Physik):

* N_0 : Zahl der Wandoszillatoren sei

* $N_0(n)$ von diesen im Energiezustand $n \hbar\omega$

$$\longrightarrow N_0 = \sum_{n=0}^{\infty} N_0(n) \quad \text{Gesamtenergie} \quad E = \sum_{n=0}^{\infty} n \hbar\omega N_0(n)$$

$$\longrightarrow \text{mittlere Energie pro Oszillator: } \hat{E} = \frac{E}{N_0}$$

* Boltzmann-Statistik: $N_0(n) \propto e^{-\beta n \hbar\omega}$ ("kanonische Dichtematrix")

$$\text{mit } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\longrightarrow \hat{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar\omega e^{-\beta n \hbar\omega}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar\omega}} = - \frac{d}{d\beta} \log \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar\omega}$$

$$\uparrow = -\frac{d}{d\beta} \log \frac{1}{1-e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\hbar \omega e^{-\beta \hbar \omega}}{1-e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega}-1}$$

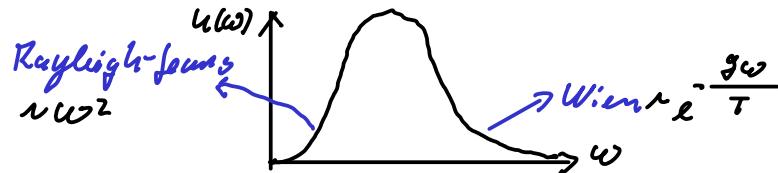
geometrische Reihe

Im thermischen Gleichgewicht entspricht die Energiedichte der Wandozillatoren der Strahlung (\rightarrow statistische Physik).
 Ersetze also in Rayleighs Herleitung: $k_B T \rightarrow \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega}-1}$

(Für kleine ω ergibt sich $\frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega}-1} \approx \frac{\hbar \omega}{1+\beta \hbar \omega} = \frac{1}{\beta} = k_B T$)

wie bei Rayleigh.)

Insgesamt erhalten wir:



$$u(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega}-1} \quad \text{Planck'sches Strahlungsgesetz}$$

\longrightarrow beschreibt erfolgreich die Grenzfälle Rayleigh-Jeans und Wien.

1900 gilt damit als Geburtsjahr der Quantenmechanik.

Bald darauf wird die physikalische Tugendheit der von Planck zunächst als Hilfskonstruktion (\hbar für „Hilfs-“) aufgetragenen Energiequantisierung und des Zusammenhangs zwischen Frequenz und Energie deutlich.

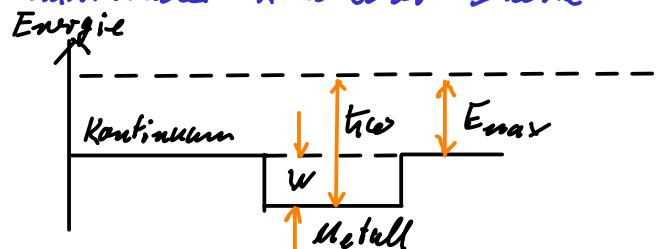
1.1.2 Photoelektrischer Effekt (Hertz 1887)

* Strahlung von Licht der Kreisfrequenz ω auf eine Metalloberfläche

\longrightarrow Emission von Elektronen mit maximaler kinetischer Energie

$$E_{\max} = \frac{1}{2} m_e v^2 = \hbar \omega - W$$

* klassische Erwartung:



Energiestromdichte $\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{H}$ sollte Emission der Elektronen erst nach bestimmter Zeit bewirken.
Außerdem sollte E_{max} unbeschränkt sein.
Tatsächlich setzt Emission sofort ein und E_{max} ist klar begrenzt.

→ Lichtquantenhypothese (Einstein 1905):

Licht besteht aus Photonen der Energie $h\nu$ - wie bei der Herleitung des Planckschen Strahlungsgesetzes.

1.1.3 Compton-Effekt (1925)

* Vierimpuls in der Speziellen Relativitätstheorie:

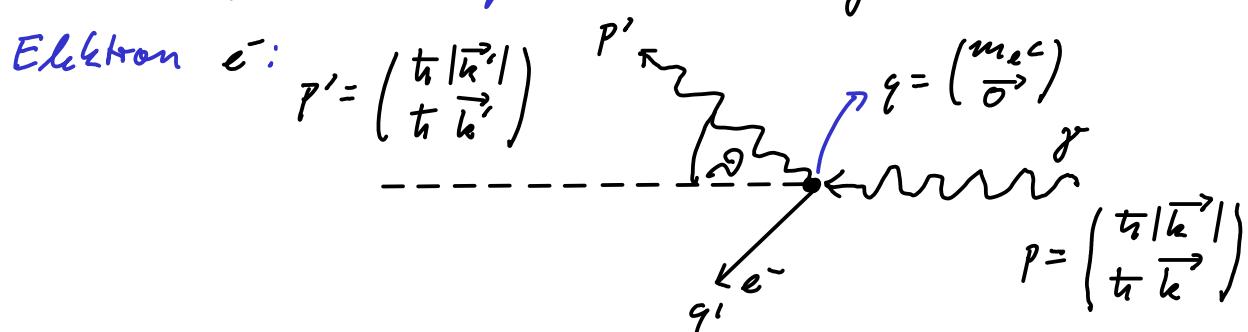
$$p = \begin{pmatrix} p^0 \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{c} E \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{mc}{\gamma} \\ \frac{m\vec{v}}{\gamma} \end{pmatrix} \quad \text{mit } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\vec{v}^2}{c^2}}}$$

$$m: \text{Ruhemasse} \quad m^2 = \frac{1}{c^2} (p^0)^2 - |\vec{p}|^2 \equiv \frac{p^2}{c^2}$$

* Für Photonen beobachtet man stets $|\vec{v}| = c$ - Lichtgeschwindigkeit!
→ Bildet Grenzfall mit $p^0 = |\vec{p}| = \frac{t_1}{c} \omega = \frac{t_1}{c} |\vec{k}|$ und $m=0$.
 $\hookrightarrow |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

Das Photon ist ein masseloses Teilchen.

* Betrachte nun den Stoß eines Photons γ an einem ruhenden Elektron e^- :



Vierimpulserhaltung:

$$p + q = p' + q'$$

$$= \left(\frac{t_1}{c} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \right) + \left(\frac{m_ec}{c} \right) = \left(\frac{t_1}{c} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \right) + \left(\sqrt{\vec{p}'^2 + m_e^2 c^2} \right)$$

Subtrahiere p' und bilde auf beiden Seiten das Viererimpulsquadrat ($v^2 \equiv v^{02} - \vec{v}^2$):

$$-2\pi^2(|\vec{k}| |\vec{k}'| - \vec{k} \cdot \vec{k}') + 2\pi m_e c (|\vec{k}| - |\vec{k}'|) + m_e^2 c^2 = m_e^2 c^2$$

$$\rightarrow |\vec{k}| - |\vec{k}'| = \frac{\pi}{m_e c} |\vec{k}| |\vec{k}'| \underbrace{(1 - \cos \vartheta)}_{= 2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{1}$$

$$\rightarrow \lambda' - \lambda = \frac{4\pi\pi}{m_e c} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 4\pi \lambda_c \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$$

mit der Compton-Wellenlänge $\lambda_c = \frac{\pi}{m_e c} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ cm}$

* Experimentelle Bestätigung dieses Effekts verifiziert die Teilchen Natur des Photons sowie die Beziehungen zwischen Energie und Frequenz sowie Impuls und Wellenlänge.

1.1.4 Materiewellen

- * Strahlung zeigt Materieeigenschaften
- * De Broglie (1924): gilt auch umgedreht.
Materie zeigt Welleneigenschaften $\sim e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{x}}$

$$E = \hbar \omega = h\nu$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \text{oder} \quad |\vec{p}| = \frac{\hbar}{\lambda}$$

- * Experimenteller Nachweis mit Elektronen:

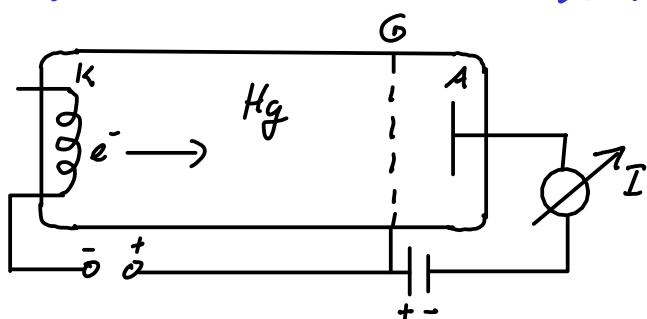
Davission & Germer (1927) am Nickel-Einkristall } Interferenz-
fönnsson (1959) am Doppelspalt } Experimente

Die De Broglie Relationen ergeben sich auch als Grenzfall für freie Zustände aus allgemeineren quantenmechanischen Gesetzen, welche schon sehr früh zur Beschreibung gebundener Zustände erfolgreich waren.

1.1.5 Bau der Atome

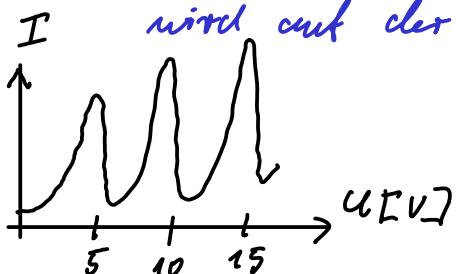
- * Thomson'sches Atommodell: positive & negative Ladungen sind kontinuierlich über den Atomradius ausgedehnt.
 - * Geiger & Marsden (1909):
α-Teilchen werden an Goldfolie nur selten und dann zu großen Winkeln gestreut.
Rutherford gelingt die quantitative Beschreibung unter der Annahme, daß der Kern eine positive Punktladung ist, welche ein Coulomb-Potential erzeugt.
→ „Planckensches Modell“ (1911): Elektronen auf Kreisbahnen um Kern.
Klassisch würde man jedoch Energieverlust durch Dipolstrahlung und schließlich Sturz des Elektrons in den Kern erwarten.
Außerdem: keine Erklärung für diskrete Emissions- / Absorptionslinien.
 - * Bohr'sches Postulat (1913):
klassische Bahnen müssen $\oint \vec{p} \cdot d\vec{x} = 2\pi \hbar n$ erfüllen und es soll keine Strahlung abgegeben werden.
jedoch keine grundlegende Begründung.
 - * (1925) Heisenberg'sche Matrizenmechanik:
→ Bewegungsgleichung für Operatoren (Matrizen)
(1926) Schrödinger'sche Wellenmechanik:
→ konstante Operatoren, zeitliche Entwicklung des Zustands (Wellenfunktion)
- 1926 gelingt Schrödinger dann die Lösung des Wasserstoffproblems, welches auch das wichtigste konkrete im der QM I vorgestellte Resultat ist.
- } äquivalente Darstellungen

- * Aufgrund unserer Strafzenadresse erwähnen wir noch den Franck-Hertz Versuch (1913):



Elektronen bewegen sich im elektrischen Feld zwischen Kathode und Gitter. Anschließend durchlaufen sie Gegenspannung zur Anode.

- Bei Erhöhung der Spannung zwischen G und K steigt der Strom zunächst an.
- Bei ca. 5V reicht die kinetische Energie der Elektronen aus, um das Hg anzuregen. Sie geben also Energie ab, und die verbleibende Energie ist nicht mehr hinreichend, um die Gegenspannung zu durchlaufen.
- Das Ganze wiederholt sich bei 10V (die Anfangsenergie wird auf der halben Strecke erreicht), 15V etc.



Fazit

- * Quantenmechanik wurde zunächst heuristisch eingeführt um einzelne, der ansonsten erfolgreichen klassischen Physik widersprechende, Befunde zu erklären.
- * Es zeigt sich aber, daß die Quantenmechanik auch die Struktur und Eigenschaften der Materie beschreibt. (Gegenwärtige grundlegende Theorie: Standardmodell der Teilchenphysik) Sie ist somit auch Grundlage der modernen Chemie, Molekulärbiologie, Elektronik, Materialwissenschaften, ...
→ radikale Erweiterung der Fragestellungen und Anwendungen der Physik.

* Wir wollen im diesem Semester die Grundlagen dieser für die modernen Naturwissenschaften und die Technik wesentlichen Theorie vermitteln.

1.2 Wellenfunktion und Schrödinger-Gleichung

Dieses Kapitel: schrittweise Einführung der grundlegenden Annahmen und mathematischen Strukturen der Quantenmechanik.

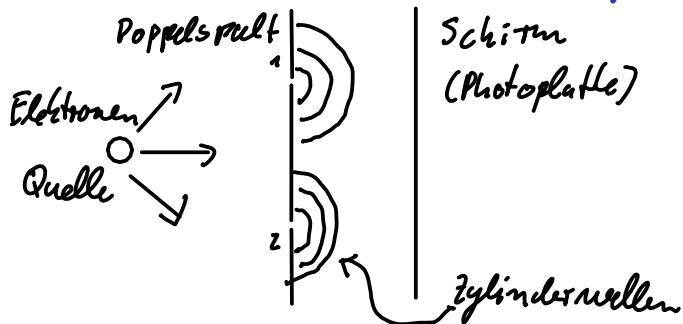
Nach ersten Beispielen im Kapitel 2 folgt eine systematische und verallgemeinerte Zusammenfassung der Grundlagen der Quantenmechanik im Kapitel 3.

Status in der klassischen Physik:

- * Maxwell'sche Feldtheorie beschreibt nicht die Teilcheneigenschaft des Photons.
- * Newton'sche Mechanik / Einstein'sche Spezielle Relativitätstheorie beschreibt nicht die Welleneigenschaft von Materieteilchen.
→ Benötige eine neue Theorie, welche diesen Welle-Teilchen-Dualismus im konsistenter Weise umfasst.

1.2.1 Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeit

- * Betrachte das Röntgen'sche Doppelspaltexperiment mit Elektronen (analog zum Young'schen Experiment mit Licht).



- * Einzelne Elektronen hinterlassen einen schwarzen Punkt auf dem Schirm.

- * De Broglie: Elektronen haben Wellenfunktion $\psi = C e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{x}}$
mit $\omega = \frac{E}{\hbar}$, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$.

* Ein Spalt offen:

Es entsteht kein Interferenzmuster.

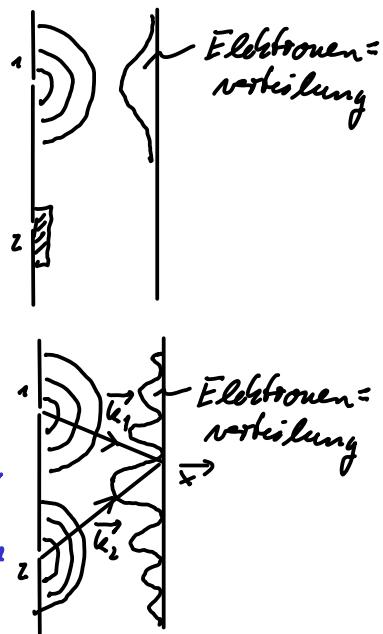
Die Punktldichte ist $\propto |\psi|^2 = |\psi_1|^2$

* Beide Spalte offen: \rightarrow Interferenzmuster

Punktldichte ist $\propto |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$

Maxima für $(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{x} = 2\pi n$ mit $n \in \mathbb{Z}$

* Wellenfunktion ψ ergibt sich als Überlappung (Summe) der Wellenfunktionen, welche von den einzelnen Spalten ausgehen.



Wir merken aber an, daß diese Interferenz nicht notwendig durch verschiedene Elektronen zustande kommt.

Man kann auch einzelne Elektronen nacheinander durch den Doppelspalt senden und erhält das gleiche Resultat.

\rightarrow Hypothese:

Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ ergibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$e(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2.$$

Genauer gesagt ist $e(\vec{x}, t) d^3x$ die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron im Volumenelement d^3x zu beobachten.

Fazit:

Die Wellenfunktion unterliegt einer deterministischen Gleichung (d.h. der im Folgenden erläuterten Schrödingergleichung).

Konzeptionell nun ist aber, daß zu Messungen nur Wahrscheinlichkeitsaussagen getroffen werden, wobei der Beobachter oder das Meßgerät als klassisches physikalisches System idealisiert wird und nicht als Teil des Quantensystems betrachtet wird.

Bei einer genaueren Behandlung des Meßprozeß unterscheiden sich verschiedene Interpretationen der Quantenmechanik, welche

allerdings identische physikalische Voraussagen treffen.

Zu einer vertieften Diskussion ist es aber nützlich, die Theorie zunächst im konkreten Einzelheiten zu entwickeln und anhand von Beispielen Intuition zu gewinnen.

Letztlich ermöglicht die Wahrscheinlichkeitsdeutung der Wellenfunktion die konsistente Behandlung des Welle-Teilchen-Dualismus, so daß wir diese als erfolgreiche Hypothese akzeptieren.

1.2.2 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Nach der Brügel lautet die Wellenfunktion

$$\psi = C * e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{x}} = C * e^{-\frac{i}{\hbar} Et + \frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{x}}$$

$\xrightarrow{\text{Konstante}}$

Verlange den nichtrelativistischen Zusammenhang $E = \frac{\vec{P}^2}{2m}$

Dann ist ψ Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen der Masse m :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(x, t)$$

Normierung ist dabei so gewählt, daß auf beiden Seiten die kinetische Energie die Wellenfunktion multipliziert.

Ableitungsoperatoren erzeugen offenbar Faktoren von Energie oder Impuls.

Wir können identifizieren:

$$\begin{array}{ll} \text{Energie } E \longleftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \equiv \hat{E} & \text{Energieoperator} \\ \text{Impuls } \vec{P} \longleftrightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \equiv \hat{\vec{P}} & \text{Impulsoperator} \end{array}$$

Wir verwenden das gleiche Symbol für eine klassische Größe wie für den zugeordneten quantenmechanischen Operator. Was gemeint ist, sollte stets aus dem Kontext hervorgehen.

Es bestände auch die Möglichkeit der Wahl einer 2. Zeitabhängung, was zu einer relativistischen Wellengleichung (Klein-Gordon-Gleichung) führen würde.
Fachlich problematisch, da

- * negative Energien auftreten,

- * keine Kontinuitätsgleichung (notwendig zur Wahrscheinlichkeitsinterpretation, siehe unten) gilt.

In der Quantenfeldtheorie gelingt aber letztlich doch eine relativistische Formalisierung.

1.2.3 Schrödinger-Gleichung im Potential und zeitunabhängigem Fall

Hamilton-Funktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

gibt in der klassischen Mechanik die Energie eines Teilchens am Ort \vec{x} im Potential $V(\vec{x})$ an.

Ersatzung des Impulses \vec{p} durch den Impulsoperator ergibt

Hamilton-Operator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})$$

Anwendung von H auf ψ ergibt ψ mal die Energie.

Wir erhalten die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H \psi(\vec{x}, t)$$

oder auch ihre berühmte Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t)$$

Wichtiger Spezialfall: $V(\vec{x})$ hängt nicht explizit von der Zeit ab. \longrightarrow Separationsansatz:

$$\psi(\vec{x}, t) = f(t) \psi(\vec{x})$$

$$\rightarrow \frac{1}{f(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \frac{1}{\psi(\vec{x})} H \psi(\vec{x})$$

Linke Seite hängt nur von t ab, rechte Seite nur von \vec{x}

\Rightarrow Beide Seiten sind gleich einer Konstante E , welche wir mit der Energie des Zustandes identifizieren.

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E f(t) \Rightarrow f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et + i\varphi}$$

Die Phase φ ist eine Integrationskonstante. Wir werden noch sehen, daß diese unphysikalisch ist, d.h. beobachtbare Voraussagen sind unabhängig von φ , weshalb wir z.B. $\varphi=0$ wählen können.

Für den ortsabhängigen Anteil erhalten wir die

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$H\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

In Analogie zu Matrixgleichungen der linearen Algebra ist dies ein Eigenwertproblem, was wir noch formal und genauer erklären werden.

Die Lösung dieses Eigenwertproblems zunächst für einfache eindimensionale und letztlich für das Coulombpotential in drei Dimensionen wird den größten Raum dieser Vorlesungen einnehmen.

1.2.4 Kontinuitätsgleichung

Betrachte zunächst eine klassische Dichte $\rho(\vec{x}, t)$ welche sich zeitlich gemäß des Geschwindigkeitsfeldes $\vec{v}(\vec{x}, t)$ entwirkt. Dann definieren wir die Stromdichte: $\vec{j}(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)$. Zeitliche Änderung des Inhalts eines Volumens V entspricht dem Fluß durch die Oberfläche S (Flächenelement $d\vec{a}$):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) = - \oint_S d\vec{a} \cdot \vec{v}(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t) = - \oint_S d\vec{a} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t)$$

Mit Gauß'schem Integralsatz folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t)$$

Soll für beliebige V gelten \Rightarrow

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$$

Ersetze nun klassisch \rightarrow quantenmechanisch:

$$\rho(\vec{x}, t) \rightarrow \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)$$

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \rho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t) \rightarrow \vec{j}(\vec{x}, t) = \operatorname{Re} \left[\psi^*(\vec{x}, t) \frac{\vec{p}}{m} \psi(\vec{x}, t) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(\vec{x}, t) (\vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t)) - (\vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t) \right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \nabla \cdot \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{\nabla}^2 \psi) - (\vec{\nabla}^2 \psi^*) \psi]$$

Andererseits folgt aus der Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho &= \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} = \frac{i}{\hbar} (H \psi^*) \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* (H \psi) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [(\vec{\nabla}^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi)] = - \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

Wenn möglich, normieren wir die Wellenfunktion auf eine Gesamtwahrscheinlichkeit von eins:

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

wobei wir über den gesamten Raum integrieren.

Sofern der Teilchenfluß durch die Flächen im Unendlichen verschwindet gilt also:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

Diese Eigenschaft der Wahrscheinlichkeitserhaltung ist Konsequenz

der Tatsache, daß die Schrödinger-Gleichung 1. Ordnung in der Zeit ist.

Außerdem folgt aus der 1. Ordnung der Zeitableitung, daß zu einem gewissen Zeitpunkt t der Zustand des Systems völlig durch die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ charakterisiert ist (und nicht über deren Zeitableitungen), da diese die notwendigen und hinreichenden Randbedingungen für die Schrödinger-Gleichung definiert.

1.2.5 Wellenpaket

Überlege nun, inwiefern die Wellenmechanik die Bewegung einzelner freier Teilchen beschreibt.

Schrödinger-Gleichung ist linear und homogen

→ allgemeine Lösung für freie Teilchen ist Superposition der Lösungen aus 1.2.2:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m} t)}$$

$\hookrightarrow \mathbb{R}^3 \longrightarrow \psi$

Eine solche Superposition verschiedener Impulszustände bezeichnen wir als Wellenpaket.

Als Beispiel betrachten wir ein eindimensionales Gaußsches Wellenpaket:

$$\varphi(p) = A e^{-\frac{d^2}{t_1^2} (p - p_0)^2}$$

(3D Fall ergibt sich als Produkt dreier 1D-Pakete)

$$\rightarrow \psi(x, t) = \frac{A}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{d^2}{t_1^2} (p - p_0)^2} e^{\frac{i}{\hbar} (px - \frac{p^2}{2m} t)}$$

$$= \frac{A}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\underbrace{\left(\frac{d^2}{t_1^2} + \frac{t}{2m\hbar}\right)p^2}_{=a}} \underbrace{2\left(\frac{d^2}{t_1^2} p_0 + \frac{ix}{2\hbar}\right)p}_{=b} - \underbrace{\frac{d^2}{t_1^2} p_0^2}_{=c}$$

$$= \frac{A}{2\pi t_0} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-a(p - \frac{b}{a})^2 + \frac{b^2}{a} - c} = \frac{A}{2\pi t_0} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{a} - c}$$

\square - Ergänzung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

→ Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{A^2}{(2\pi t_0)^2} \frac{\pi}{|a|} e^{2\operatorname{Re}\left[\frac{b^2}{a} - c\right]}$$

Wir definieren nun $\rightarrow a = \frac{d^2}{t_0^2} + i \frac{4d^2}{t_0^2}$

$$v = \frac{p_0}{m}, \quad \Delta \equiv \Delta(t) = \frac{t t_0}{2 m d^2}$$

und schreiben den Exponenten als: $|a|^2 = \frac{d^4}{t_0^4} (1 + \Delta^2)$

$$\begin{aligned} 2\operatorname{Re}\left[\frac{b^2 - ac}{a}\right] &= \frac{2\operatorname{Re}[(b^2 - ac)a^*]}{|a|^2} = -\frac{t_0^4}{d^4} \frac{1}{1 + \Delta^2} \frac{d^2}{2t_0^4} (x - vt)^2 \\ &= -\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta^2)} \end{aligned}$$

mit den Nebenrechnungen

$$b^2 - ac = \frac{d^4}{t_0^4} m^2 v^2 - \frac{x^2}{4t_0^2} + i \frac{x d^2 m v}{t_0^3} - \frac{d^4}{t_0^4} m^2 v^2 - i \frac{t d^2}{2t_0^3} m v^2$$

$$\operatorname{Re}[(b^2 - ac)a^*] = -\frac{x^2 d^2}{4t_0^4} + \frac{x d^2 t v}{2t_0^4} - \frac{t^2 d^2}{4t_0^4} v^2 = -\frac{d^2}{4t_0^4} (x - vt)^2$$

Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2\operatorname{Re}\left[\frac{b^2 - ac}{a}\right]} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta^2)}} = \sqrt{2\pi} d \sqrt{1 + \Delta^2}$$

$$\rightarrow \underbrace{\frac{A^2}{(2\pi t_0)^2} \frac{t_0^2}{d^2} \frac{\pi}{\sqrt{1 + \Delta^2}}}_{\text{Vorfaktor}} \underbrace{\sqrt{2\pi} d \sqrt{1 + \Delta^2}}_{\text{dx Integral}} = 1 \Rightarrow A = (8\pi d^2)^{\frac{1}{4}}$$

→ Wahrscheinlichkeitsverteilung im Ortsraum:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{d \sqrt{2\pi (1 + \Delta^2)}} e^{-\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta^2)}}$$

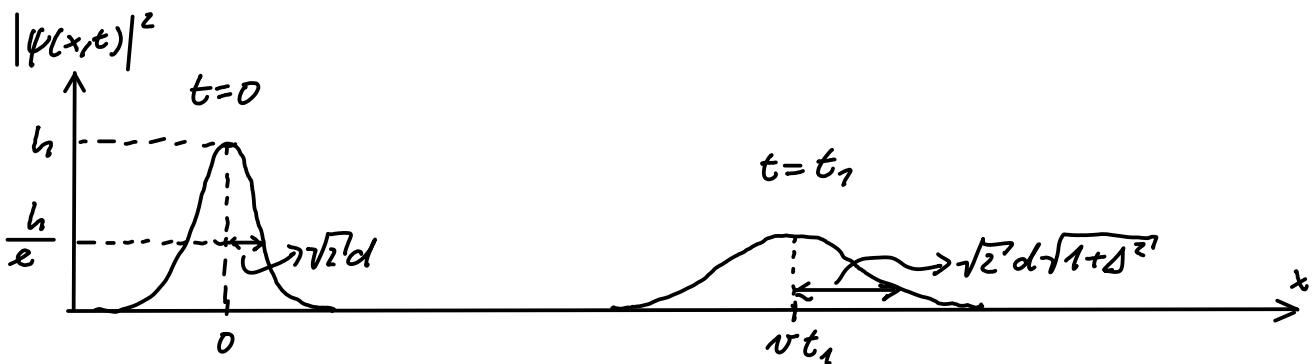
- * wieder eine Gauß-Verteilung
- * Gruppengeschwindigkeit am Maximum:

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \Big|_{P=P_0} = \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{t_0 k^2}{2m} \right) \Big|_{P=P_0} = \frac{P_0}{m} \rightarrow \text{klassisches Verhalten}$$

- * vgl. Phasengeschwindigkeit der einzelnen Wellen:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{t_0 k^2}{2m} \frac{1}{k} = \frac{P_0}{2m} \rightarrow \text{wellenmechanisches Verhalten}$$

- * $\Delta x t$ nimmt zu \rightarrow Wellenpaket fließt auseinander



Ortsmittelwert und Schwankungsquadrat

Erwartungswert:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)| |\psi(x, t)|^2$$

Ortsmittelwert:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 x = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 (x - vt) + \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 vt \\ &\quad \downarrow \text{gerade in } (x-vt) \\ &= vt \end{aligned}$$

Schwankungsquadrat:

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &:= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 (x - vt)^2 \\ &= \frac{1}{d \sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - vt)^2 e^{-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}} \\ &= \frac{1}{d \sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[2d^2(1+\Delta^2) \right]^{\frac{3}{2}} = d^2(1+\Delta^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} \\ &= -\frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \\ &= -\frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta x = d \sqrt{1 + \Delta^2}$$

Zur besseren Einordnung folgende Zahlenbeispiele:

(1) Makroskopischer Körper mit Masse $m=1\text{g}$

soll mit mechanischer Einrichtung sehr genau plaziert werden:

$$d = 10^{-4}\text{ cm}$$

$$\tau_h = 1,055 * 10^{-27} \frac{\text{erg s}}{\text{s}} = 1,055 * 10^{-27} \frac{\text{g cm}^2}{\text{s}}$$

$$\Delta = \frac{t \tau_h}{2m\Delta^2} = 1 \quad \text{nach} \quad \frac{2m\Delta^2}{\tau_h} \propto 2 \times 10^{19} \text{s} \gg \text{Alter des Universums}$$

(2) Elektron $m = 9,109 * 10^{-28} \text{ g}$

$$\text{atomare Längenskala: } d = 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\Delta = 1 \quad \text{nach} \quad 1,8 * 10^{-16} \text{ s} \ll \text{Lebensdauer angeregter atomarer Zustände}$$

1.2.6 Impultraum

$\mathcal{E}(\vec{x}, t) d^3x = |\psi(\vec{x}, t)| / d^3x$: Wahrscheinlichkeit, Teilchen im Volumen d^3x um Ort \vec{x} anzutreffen

Analog suchen wir nun:

$W(\vec{p}, t) d^3p$: Wahrscheinlichkeit, Teilchen im Impultraum-
element d^3p um den Impuls \vec{p} anzutreffen.

Normierung: $\int d^3p W(\vec{p}, t) = 1$.

Ziel:

Entwickle $\psi(\vec{x}, t)$ in Eigenfunktionen des Impulses und benutze diese zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten im Impultraum.

Nützlich ist die im vorigen Abschnitt eingeführte Funktion φ :

$$\varphi(\vec{p}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m} t)}$$

$$\begin{aligned} & \equiv \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\vec{p}, t) e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} \\ & \stackrel{p = \hbar k}{=} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \varphi(\vec{k}, t) e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} \end{aligned}$$

Wir verwenden das gleiche Symbol φ für verschiedene Varianten dieser Funktion, was wir durch die Argumente andeuten.

Der unterste Ausdruck entspricht einer inversen Fouriertransformation.

Zur Erinnerung: Funktionenräume und Fouriertransformation

$$\text{Norm: } \|f\|_p = \left(\int d^m x |f(x)|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

Die Menge der Funktionen mit $\|f\|_p < \infty$ heißt L^p
(und bildet genaugenommen einen Banachraum, d.h. vollständig und normiert).

Für $f \in L^1$ existiert die Fouriertransformation

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \int d^m x e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x})$$

Ist ebenso $\tilde{f} \in L^1$, dann gilt die Rücktransformation

$$f(\vec{x}) = \int \frac{d^m k}{(2\pi)^m} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} \tilde{f}(\vec{k})$$

Relevant in der Quantenmechanik: $f \in L^2$

→ dann existiert

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|x| < R} d^m x e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x})$$

und es gilt $\tilde{f} \in L^2$.

Die Veränderung der Faktoren $\frac{1}{2\pi}$ auf die $d^m x$ und $d^m k$

Integral ist Konvention.

Wir fassen also folgendes als Wellenfunktion im Impultraum auf:

$$\varphi(\vec{p}, t) = \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}, t)$$

Zur Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte im Impultraum erinnern wir an den

Satz von Parseval-Plancherel:

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi^*(\vec{p}, t) \varphi(\vec{p}, t) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \varphi^*(\vec{x}, t) \int d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'} \psi(\vec{x}', t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}_{= (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')} \varphi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}', t) \\ &= \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 \end{aligned}$$

Die Fouriertransformation erhält also die L^2 -Norm.

→ Interpretation:

$$W(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} |\varphi(\vec{p}, t)|^2 \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte im Impultraum}$$

→ Erwartungswerte im Impultraum:

$$\langle f(\vec{p}) \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}) |\varphi(\vec{p}, t)|^2$$

Für das eindimensionale Wellenpaket aus 1.2.5 berechnen wir z.B.

$$\varphi(p, t) = (8\pi d^2)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{d^2}{\hbar^2} (p - p_0)^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t}$$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \sqrt{8\pi} d \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar t_0} p e^{-\frac{2d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2} \\ &= \sqrt{8\pi} d \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar t_0} (p-p_0) e^{-\frac{2d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2} + \sqrt{8\pi} d p_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar t_0} e^{-\frac{2d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{dp_0}{\hbar} \sqrt{\frac{t_0^2\pi}{2d^2}} = p_0 \text{ wie erwartet}\end{aligned}$$

Berechnung des Impuls Erwartungswertes direkt aus der Ortswellenfunktion:

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} \rangle &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar t_0)^3} \varphi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \varphi(\vec{p}, t) \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar t_0)^3} \int d^3 x' e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'} \varphi^*(\vec{x}', t) \vec{p} \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \varphi(\vec{x}, t) \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar t_0)^3} \int d^3 x' \int d^3 x \varphi^*(\vec{x}', t) i\hbar (\vec{\nabla}_x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})}) \varphi(\vec{x}, t) \\ &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar t_0)^3} \int d^3 x' \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} \varphi^*(\vec{x}', t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x \varphi(\vec{x}, t) \\ &= \int d^3 x' \int d^3 x \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}) \varphi^*(\vec{x}', t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x \varphi(\vec{x}, t) \\ &= \int d^3 x \varphi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \varphi(\vec{x}, t)\end{aligned}$$

Für die partielle Integration haben wir benutzt, daß gemäß des Satzes von Gauß das Integral über eine Divergenz verschwindet, sofern der Integrand für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ schnell genug abfällt, so daß der Oberflächenterm vernachlässigbar ist:

$$\begin{aligned}\int d^3 x \vec{\nabla} \cdot \vec{F}(\vec{x}) &= \oint_S d\vec{a} \cdot \vec{F}(\vec{x}) & \vec{F}(\vec{x}) &= f(\vec{x}) \hat{e}_i \\ \int d^3 x \frac{\partial}{\partial x_i} f(\vec{x}) &= \oint_S d\vec{a} \cdot \hat{e}_i f(\vec{x}) & f(\vec{x}) &= g(\vec{x}) h(\vec{x}) \\ \int d^3 x g(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} h(\vec{x}) &= - \int d^3 x h(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} g(\vec{x}) + \underbrace{\oint_S d\vec{a} \cdot \hat{e}_i g(\vec{x}) h(\vec{x})}_{S} \quad \text{für } f \text{ quadratintegrabel \& } V \rightarrow \infty : = 0\end{aligned}$$

Wir stellen fest:

Der „gesandwichtete“ Term ist genau der im 1.2.2 postulierte Impulsoperator.

Entsprechend können wir aus der Wellenfunktion im Impulsraum den Ortswartungswert bestimmen – an der Struktur obiger Rechnung ändert sich dann nur das Vorzeichen in den Fourier-Exponentialfunktionen.

$$\overrightarrow{x} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi^*(\vec{p}, t) i\hbar \vec{\nabla}_p \varphi(\vec{p}, t) \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p_x} \\ \frac{\partial}{\partial p_y} \\ \frac{\partial}{\partial p_z} \end{pmatrix}$$

Bezeichne nun $\Theta = \vec{x}, \vec{p}$ entweder den abstrakten Orts- oder Impulsoperator, dessen konkrete Form von der Verwendung im Orts- oder Impulsraum abhängt.

Dann gilt für den Erwartungswert:

$$\langle \Theta \rangle = \int d^3 x \psi^*(\vec{x}, t) \Theta \psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi^*(\vec{p}, t) \Theta \varphi(\vec{p}, t)$$

wobei für Θ folgendes einzusetzen ist:

	abstrakte Bezeichnung	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
Ort	\vec{x}	\vec{x}	$i\hbar \vec{\nabla}_p$
Impuls	\vec{p}	$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x$	\vec{p}

In Kapitel 3 zeigen wir, daß sich diese „Sandwich-Formeln“ direkt auf andere Observablen und deren zugeordnete Operatoren verallgemeinern lassen.

1.2.7 Vertauschungsrelationen

Beim Wechsel zwischen Orts- und Impulsraum ist also für einen allgemeinen Operator A in geeigneter Weise zu ersetzen:

$$A(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \vec{v}_x) \longleftrightarrow A(\vec{p}, i\hbar \vec{v}_p)$$

Ist eine Gleichung $G(A(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \vec{v}_x), B(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \vec{v}_x), \dots) = 0$ im Ortsraum erfüllt, so sollte diese auch im Impultraum gelten:
 $G(A(\vec{p}, i\hbar \vec{v}_p), B(\vec{p}, i\hbar \vec{v}_p), \dots) = 0$

Für zwei Operatoren A, B ist insbesondere der Kommutator ("Vertauscher") nützlich:

$$[A, B] = AB - BA$$

Beispiel: $[x_i, p_j]$

(1) Ortsraum:

$$\begin{aligned} [x_i, p_j] &= x_i \frac{\hbar}{i} \nabla_j - \frac{\hbar}{i} \nabla_j x_i = x_i \frac{\hbar}{i} \nabla_j - \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} - \frac{\hbar}{i} x_i \nabla_j \\ &= i \hbar \delta_{ij} \quad \text{Kronecker-S} \end{aligned}$$

Das Resultat ist eine \mathbb{C} -Zahl, sollte also übereinstimmen mit der Rechnung im

(2) Impultraum:

$$[x_i, p_j] = i \hbar \nabla_{p_i} p_j - p_j i \hbar \nabla_{p_i} = i \hbar \delta_{ij} + i \hbar p_j \nabla_{p_i} - p_j i \hbar \nabla_{p_i} = i \hbar \delta_{ij}$$

Weitere wichtige Kommutatoren (Rechnung im Ortsraum):

$$[x_i, x_j] = 0 \quad [p_i, p_j] = -\hbar^2 (\nabla_i \nabla_j - \nabla_j \nabla_i) = 0$$

$$[\hbar, x_i] = -\frac{\hbar^2 \vec{V}^2}{2m} x_i + x_i \frac{\hbar^2 \vec{V}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_i = -i \frac{\hbar}{m} p_i$$

$$[H, p_i] = V(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla_i - \frac{\hbar}{i} \nabla_i V(\vec{x}) = i \hbar \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_i}$$

Fazit:

Operatoridentitäten, insbesondere Kommutatoren, sind nützliche und darstellungsunabhängige (Orts-/Impultraum) Gleichungen in der Quantenmechanik.

1.2.8 Orts-Impulsunsicherheit

Betrachte nun wieder das Gauß'sche Wellenpaket

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi}(1+\Delta^2)} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}} \rightarrow \Delta x = d\sqrt{1+\Delta^2} \quad (\Delta = \frac{t\hbar}{2md^2})$$

$$|\psi(p, t)|^2 = 2\sqrt{\pi} d e^{-\frac{2d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

→ Schwankungsquadrat für den Impuls

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-\frac{3}{2}}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle (p - p_0)^2 \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} (p - p_0)^2 |\psi(p, t)|^2 = \frac{2\sqrt{2\pi}d}{2\pi\hbar} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}d} \right)^3 = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{d^2}$$

$$\rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{2d}$$

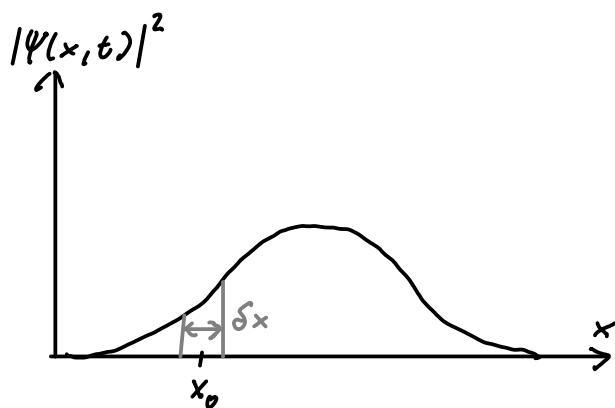
$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Dieser Spezialfall der Heisenbergschen Unschärferelation lässt sich verallgemeinern. Die Ungleichung gilt nicht nur für Gauß'sche Wellenpakte sondern auch für weitere Paare von Observablen.

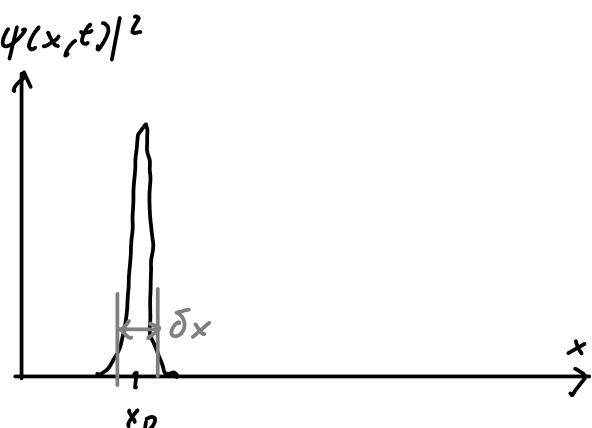
Zusammenhang der Unschärferelation mit Meßprozeß:

- * Zeitentwicklung von $\psi(\vec{x}, t)$ ist deterministisch
- * Nichtdeterministisch ist hingegen die zeitliche Entwicklung von Meßgrößen (Observablen) wie z.B. $\langle \vec{x} \rangle$, $\langle \vec{p} \rangle$, $\Delta \vec{x}$, $\Delta \vec{p}$ etc.
- * Unschärferelation ist also eine Aussage über die simultane Meßbarkeit von Ort und Impuls.

- * Betrachte z.B. Detektor mit Ortsauflösung δx .
- * Teilchen wird am Ort x_0 gemessen.
- * Skizziere Wellenfunktion unmittelbar vor/nach der Messung:



unmittelbar vor Messung
 $d \gg \Delta x$

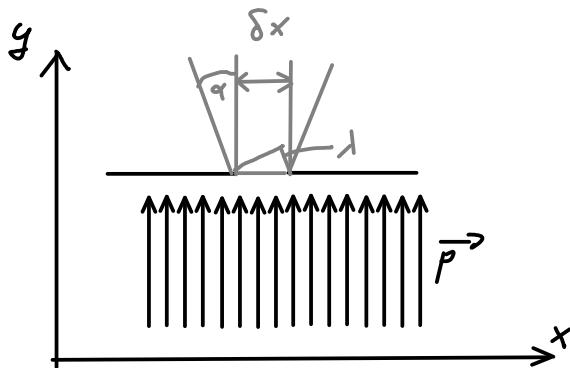


unmittelbar danach
 $d \approx \Delta x$

- * Offenbar reduziert die Messung die Ortsunschärfe und erhöht die Impulsunschärfe.
- * Da Δ wächst, fliegt das Wellenpaket rasch auseinander.
- * Unmittelbar nach der Messung gilt näherungsweise:
 $x \psi(x,t) \approx x_0 \psi(x,t)$
 → Man sagt die Wellenfunktion „kollabiert“ in einen Eigenzustand von x mit Eigenwert x_0
 (→ präzise Fassung dieser Begriffe in Kapitel 3).
- * Bestimmung der vollen Wahrscheinlichkeitsverteilung durch häufige Wiederholung der Messung mit gleich präpariertem Anfangszustand.

Messung durch Ausblenden

Fasse obige qualitative Argumente quantitativ durch Festlegung der Prozedur der Ortsmessung



Es soll gelten:

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar t}{P} \ll \Delta x$$

vor dem Spalt:

$$\left. \begin{array}{l} \langle \vec{p} \rangle = p \hat{e}_y \\ \Delta \vec{p} = 0 \end{array} \right\} \longrightarrow \psi(\vec{x}, t) \propto e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad \vec{k} = \frac{p}{\hbar} \hat{e}_y$$

hinter dem Spalt:

$$\Delta x \approx \delta x$$

klassisch: $\Delta \vec{p} = 0 \rightarrow \Delta x \Delta p_x = 0$ (im Widerspruch zur Unschärferelation)

quantenmechanisch: der Strahl wird gebrochen \rightarrow Interferenz

1. Minimum im Winkel

$$\alpha \approx \frac{\lambda}{\delta x} \approx \frac{2\pi\hbar}{p} \frac{1}{\Delta x} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta x p}$$

Impulsunschärfe durch Beugung: $\Delta p_x \approx p \alpha$

$$\rightarrow \frac{\Delta p_x}{p} \approx \frac{2\pi\hbar}{\Delta x p} \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \approx 2\pi\hbar$$

im Einklang mit der Unschärferelation (saturiert diese aber nicht)

Messung durch Streuung mit Photonen

* aus der Optik bekannt: maximale Auflösung eines „Mikroskops“: $\Delta x \approx \lambda$ (Wellenlänge des Lichts)

* $p_g = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ Impuls des Photons
 \rightarrow Streuung mit Elektron führt zu $\Delta p \approx p_g$

$$\rightarrow \Delta x \Delta p \approx 2\pi\hbar$$

Messungen führen zu einem „Kollaps“ der Wellenfunktion

\rightarrow Im Prinzip kann die Wellenfunktion so verallgemeinert werden, daß diese auch den Meßapparat umfaßt.

Jedoch: auch die Meßapparatur wird wieder abgelesen / beobachtet. Die Grenze zwischen Quantenzustand und Meßapparatur ist somit willkürlich („Demaskierungsproblem“)

aber irrelevant für die Voraussagen, sofern der Meßapparat klassisch beschrieben werden kann. In Kapitel 3 werden wir u.a. aus diesem Grunde noch quantitative Kriterien für die Anwendbarkeit der klassischen Physik formulieren.