3.2.3 Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

- V reell, so folgt:

$$(H\Psi)^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + V\Psi^* \qquad (3.30)$$

$$\Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\{\Psi^*(\Delta\Psi) - (\Delta\Psi^*)\Psi\} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla(\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi)^*\Psi\} \qquad (3.31)$$

- Eingesetzt in (3.16), Integration über festes endliches Volumen V:

$$\frac{d}{dt}\int_V d^3\underline{r}\; P(\underline{r},t) = -\frac{\hbar}{2mi}\int_V d^3\underline{r}\; \nabla\cdot\{\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi)^*\Psi\}$$

$$=: -\int_V d^3\underline{r}\; \nabla\cdot\underline{j}(\underline{r},t) \qquad (3.32)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\boxed{\begin{aligned}\underline{j}(\underline{r},t) &= \frac{\hbar}{2mi}\{\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi)^*\Psi\} \\ &= \mathrm{Re}\left\{\Psi^*\frac{\hbar}{im}\nabla\Psi\right\}\end{aligned}} \qquad (3.33)$$

- Es folgt:

i) Es gilt eine Erhaltungsgleichung für die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\underline{r},t) + \nabla\underline{j}(\underline{r},t) = 0 \qquad (3.34)$$

ii) Wenn Ψ rein reell, dann ist $\underline{j} = 0$.

iii) Mit dem Gaußsatz folgt aus (3.32)

$$\frac{d}{dt}\int_V d^3\underline{r}\; P(\underline{r},t) = -\int_{\partial V}\underline{j}(\underline{r},t)\cdot d\underline{f} \qquad (3.35)$$

$\overset{?}{\to} 0$ für $V \to \infty$, da Ψ quadratintegrabel ?

iv) Abschätzung:

Ψ quadratintegrabel, daher

$$\lim_{|\underline{r}|\to\infty} |\Psi| < \frac{1}{|\underline{r}|}$$

$$\lim_{|\underline{r}|\to\infty} |\underline{j}| \overset{(3.33)}{<} \frac{1}{|\underline{r}|^3}$$

$$\lim_{V\to\infty} \left| \int_{\partial V} d\underline{f} \cdot \underline{j} \right| < \lim_{R\to\infty} \int d\Omega\, R^2 \frac{1}{R^3} = 0$$

v) Also ist r. S. von (3.35) null, H aus (3.9) hermitesch und die Wahrscheinlichkeit erhalten.

3.4. Erwartungswerte von Operatoren

3.4.1. Vom Ortsoperator und dessen Funktionen

- Mittelwert des Ortsoperators oder Schwerpunkt:

$$\langle \underline{r} \rangle = \langle \underline{r} \rangle (t) = \int d^3\underline{r}\; \underline{r}\; P(\underline{r},t) =$$

$$= \int d^3\underline{r}\; \Psi^*(\underline{r},t)\; \underline{r}\; \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.36), (2.43)$$

Drei Gleichungen!

- Mittelwert einer Observablen $A(\underline{r},t)$:

$$\langle A(\underline{r},t) \rangle = \int d^3\underline{r}\; A(\underline{r},t)\; P(\underline{r},t) =$$

$$= \int d^3\underline{r}\; \Psi^*(\underline{r},t)\; A(\underline{r},t)\; \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.37)$$

z. B. $A(\underline{r},t) = r^3$, mittleres Abstandsquadrat des Teilchens v. Ursprung.

2.4.3 Fouriertransformation und Impulsraumwellenfunktion

• Sei $\psi(x) := \Psi(x, t=0)$, dann sind gemäß (2.20)

$$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \varphi(p)\, e^{ipx/\hbar}$$

und (2.43')

$$\varphi(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}$$

Fouriertransformierte

• Erweitere die Definition auf eine Impulsraumfunktion $\Phi(\underline{r}, t)$ derart, dass

$$\Psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \Phi(p,t)\, e^{ipx/\hbar} \qquad (2.44a')$$

und daher

$$\Phi(p,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi(x,t)\, e^{-ipx/\hbar} \qquad (2.44b')$$

• Da aus (2.11)

$$\Phi(p,t) = \varphi(p)\, e^{-iE(p)t/\hbar} \qquad (2.45')$$

ist zu allen Zeiten $|\Phi|^2$ und somit auch $|\Psi|^2$ auf 1 normiert: Erhaltung der Wahrscheinlichkeit.

• $\Pi(p,t) := |\Phi(p,t)|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum, d.h.

$$\int_{p_1}^{p_2} dp\, |\Phi(p,t)|^2 \qquad (2.46')$$

ist die Wahrscheinlichkeit, beim Teilchen einen Impuls im Intervall $[p_1, p_2]$ zu (finden) messen.

3.4.2. Vom Impulsoperator und dessen Funktionen

- $\phi(\underline{p},t)$ (2.20b) ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude im Impulsraum.

$$\langle \underline{p} \rangle = \langle \underline{p} \rangle (t) \overset{(2.44)}{=} \int d^3\underline{p}\ \phi^*(\underline{p},t)\ \underline{p}\ \phi(\underline{p},t) \qquad (3.38)$$

- Observable $g(\underline{p},t)$ z.B. $g(\underline{p},t) = \frac{p^2}{2m}$:

$$\langle g(\underline{p},t) \rangle = \int d^3\underline{p}\ \phi^*(\underline{p},t)\, g(\underline{p},t)\, \phi(\underline{p},t) \qquad (3.39)$$

- Man kann den Mittelwert des Impulses aber auch in der Orts~~darstellung~~raum darstellung des Impulsoperators und der Wellenfunktion berechnen:

$$\langle \underline{p} \rangle = \int d^3\underline{r}\ \Psi^*(\underline{r},t)\ \frac{\hbar}{i} \nabla\ \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.40)$$

$$\langle g(\underline{p},t) \rangle = \int d^3\underline{r}\ \Psi^*(\underline{r},t)\ g\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, t\right) \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.41)$$

- NB! Es gilt reziprok:

$$\langle \underline{r} \rangle \overset{(3.40)}{=} \int d^3\underline{p}\ \phi^*(\underline{p},t)\ i\hbar \nabla_{\underline{p}}\ \phi(\underline{p},t) \qquad (3.42)$$

3.4.3. Allgemeine Operatoren

- Nehme klassische Observable $A(\underline{r},\underline{p},t)$. Ihr Mittelwert ist

$$\hat{}\quad \langle A(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla, t) \rangle \qquad (3.43)$$

- Beispiel: $E = H = \frac{p^2}{2m} + V$

$$\langle \hat{E} \rangle = \langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \rangle + \langle V(\underline{r},t) \rangle =$$

$$= \int d^3\underline{r}\ \Psi^*(\underline{r},t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r},t) \right\} \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.44a)$$

$$\Delta E = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle^{1/2} \qquad (3.44b)$$

• Physikalische Erwartungswerte müssen reelle Zahlen sein, d.h.

$$\int d^3\underline{r}\ \Psi^* A \Psi = \int d^3\underline{r}\ (A\Psi)^* \Psi \qquad (3.45)$$

für alle quadratintegrablen Wellenfunktionen.
D.h. Operatoren, die physikalischen Observablen entsprechen, müssen hermitesch sein.

! • Hermitesch sind: $\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, \hat{T}, V, \hat{H}$

• Nicht hermitesch ist: $x p_x$. Solche Ausdrücke müssen hermitisiert werden, etwa durch Bildung von

$$\frac{1}{2}(x p_x + p_x x) \qquad (3.46)$$

3.4.4. Das Ehrenfest theorem

• Es verbindet die klassische mit der Quantenmechanik, indem es zeigt, dass die Mittelwerte der Operatoren die Newtonbewegungsgleichungen erfüllen:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \qquad (3.47)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \underset{\text{lokalisiert}}{\overset{\text{Wellenfunktion}}{=}} -\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x = \langle x \rangle} \qquad (3.48)$$

!

3.5. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

- Sei im folgenden der Hamiltonoperator zeitunabhängig, d.h. idR. $V(\underline{r},t) = V(\underline{r})$.

3.5.1. Separationsansatz

- Partikuläre Lösungen der Schrödingergleichung können durch den Separationsansatz

$$\varphi(\underline{r},t) = f(t) \cdot \psi(\underline{r}) \qquad (3.49)$$

gewonnen werden:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r},t) = H \Psi(\underline{r},t) \qquad (3.10)$$

$$\Leftrightarrow \quad \psi(\underline{r})\, i\hbar \frac{df}{dt} = f(t)\, H \psi(\underline{r})$$

$$\frac{1}{f(t)}\, i\hbar \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi(\underline{r})} H \psi(\underline{r}) \qquad (3.50)$$

l.s. nur von t, r.s. nur von $\underline{r}$ abhängig, d.h.

$$\text{l.s.} = \text{r.s.} = \text{const} =: E$$

- Folgt: $i\hbar \dfrac{df}{dt} = E f$

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \qquad (3.51)$$

- r.s. führt zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung:

$$\boxed{\begin{gathered} H\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \quad \text{bzw.} \\ \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right\}\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \end{gathered}} \qquad (3.52)$$