Erwartungswert des Impulses im Ortsraum

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x)} \, p \, \psi_{(x)} \, dx$$

- Welcher Ausdruck ist für p zu verwenden?

- im Impulsraum gilt

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \, p \, \phi \, dp \qquad \text{mit F.T. von } \phi$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi^* \, p \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi e^{-ipx/\hbar} \, dx}_{(*) \text{ partielle Integration}} dp$$

$$(*) = \underbrace{-\psi \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar} \, dx$$

da ψ normierbar und
$\psi(\infty) = \psi(-\infty) = 0$

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iint \phi^* \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) \frac{\hbar}{i} e^{-ipx/\hbar} \, dx \, dp$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{\hat{p}} \psi \, dx$$

$\hat{p}$ Impulsoperator im Ortsraum

Erwartungswert der Ortskoordinate im Impulsraum

- analog findet man

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial p}}_{=\hat{x}} \phi \, dp$$

Ortsoperator im Impulsdarstellung

Erwartungswerte im Orts- und Impulsraum

Ortsraum	Impulsraum
$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx$	$\langle x \rangle = \int \phi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi \, dp$
$\langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \, dx$	$\langle p \rangle = \int \phi^* p \phi \, dp$

Erwartungswerte von n-ten Potenzen von $\hat{p}$ und $\hat{x}$

$$\langle p^n \rangle = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi \, dx$$

$$\langle x^n \rangle = \int \phi^* (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \phi \, dp$$

<u>Beispiel:</u> Berechnung von $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{E}_{kin}$ in Ortsdarstellung

Weitere Operatoren in Ortsraumdarstellung

- Impulsoperatoren in 3D

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

- Beispiel $\langle \hat{p}_z \rangle = \iiint \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi \, dx\,dy\,dz$

- Der Hamiltonoperator

- aus Mechanik: Die Hamiltonfunktion gibt die Gesamtenergie eines Systems als Funktion der Koordinaten q_k und der dazu kanonisch konjugierten Impulse p_k an.

- Der Hamiltonoperator ist die zugehörige quantenmechanische Grösse derem Erwartungswert die Gesamtenergie des Systems angibt

- Beispiel: Bewegung eines Massepunkts mit Koordinaten x, y, z im einem Potential $V(x,y,z)$.

$$\left.\begin{aligned} p_x &= m\dot{x} \\ p_y &= m\dot{y} \\ p_z &= m\dot{z} \end{aligned}\right\} \Rightarrow E_{kin} = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$$

- zugehörige Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x,y,z)$$

- zugehöriger Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\text{Laplace-Operator } \nabla^2 = \Delta} + V(x,y,z)$$

mit Erwartungswert

$$\langle \hat{H} \rangle = \iiint_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi \, dx\,dy\,dz$$

Wichtig bei Bestimmung der möglichen Gesamtenergie eines q.m. Systems.

- Der Drehimpulsoperator

- klassischer Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Wichtig bei der Berechnung des quantisierten Drehimpuls z.B. im Wasserstoff-Atom.

$$L_x = y p_z - z p_y$$

$$L_y = z p_x - x p_z$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

- Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$

↳ ersetze Grössen im kl. Ausdruck durch zugehörige Operatoren

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Eigenschaften der Operatoren

in der Quantenmechanik

- Operatoren sind linear

$$\hat{F}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{F}\psi_1 + \hat{F}\psi_2$$

$$\hat{F}(c\psi) = c\hat{F}\psi$$

- Operatoren sind distributiv

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi$$

Was bedeutet es, dass Operatoren nicht kommutativ sind?

- Operatoren sind assoziativ

$$(\hat{F}\hat{G})\psi = \hat{F}(\hat{G}\psi)$$

- Operatoren sind im allgemeinen nicht kommutativ

- Beispiel:

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$$\neq \hat{p}_x\hat{x}\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\psi + x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

daher gilt

$$\boxed{(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi = i\hbar\psi}$$

Diese Operatorgleichung gilt allg. für kanonisch konjugierte Variable

- Kommutator zweier Operatoren $\hat{F}, \hat{G}$

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$$

$= 0 \rightarrow$ Operatoren kommutieren

$\neq 0 \rightarrow$ Operatoren kommutieren nicht

- Resultat: Erwartungswerte nicht kommutierender Operatoren können nicht gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden.

Beispiel: Gauss-förmiges Wellenpakete mit Koordinate $\hat{x}$ und Impuls $\hat{p}$

Berechne Kommutatoren der Drehimpulskomponenten im 3D.

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar}$$

Dies ist klassisch nie der Fall. klassisch Messgrösse kommutiert immer. Wie kann man diese Situation mit Hilfe von Kommutatoren beschreiben?

- Klassischer Grenzfall der Quantenmechanik

$$\hbar \rightarrow 0$$

$$\rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] \rightarrow 0$$

$\Rightarrow$ x, p können gleichzeitig beliebig genau gemessen werden

$\Rightarrow$ de Broglie Wellenlänge $\lambda \rightarrow 0$ für $\hbar \rightarrow 0$, d.h. Interferenzerscheinungen verschwinden

- Operatoren haben in der Quantenmechanik reelle Erwartungswerte

$$\boxed{\langle \hat{F} \rangle \in \mathbb{R}}$$

für physikalisch messbare Grössen, sogenannte Observable, z.B. $\hat{x}, \hat{p}, \hat{L}, \hat{H}$

- es gilt daher für beliebige physikalische Operatoren

$$\langle F(x,p) \rangle = \langle F(x,p) \rangle^*$$

$$\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* F(x,p) \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi F^*(x,p) \psi^* \, dx$$

- Operatoren, die diese Bedingung erfüllen werden Hermite'sche oder selbstadjungierte Operatoren genannt.

- Jeder Observablen F entspricht ein Hermite'scher Operator $\hat{F}$

⇒ Übung: Konstruiere hermitesche Operatoren zur Observablen $F = x p_x - p_x x$

Gibt es Messgrössen deren zugehörige Operatoren nicht automatisch hermitisch sind?

Das zweite Postulat: Die Schrödinger-Gleichung

- Bestimmung der Erwartungswerte beliebiger Observablen ist bei Kenntnis der Wellenfunktion eines Teilchens möglich.
  - $\boxed{\text{Wie bestimmt man aber die Wellenfunktion?}}$

- Die Wellenfunktion Ψ ist Lösung einer Differential-Gleichung

$$\boxed{\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi},$$

die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung genannt wird, nach Erwin Schrödinger, der diese Gleichung 1926 postulierte.

- für ein Teilchen im einem Potential V gilt für den Hamilton-Operator

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V}$$

Materie wellen sind Lösungen der SGL. Die SGL gilt allerdings viel allgemeiner.

• Beispiel: - Materiewelle eines Teilchens mit Gesamtenergie $E = \frac{p^2}{2m} + V$ und Impuls p

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

ist Lösung der Schrödinger-Gleichung.

- $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi$ Ortsableitung der Wellenfunktion

- $\frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{iE}{\hbar} \Psi$ Zeitableitung der Wellenfunktion

- Gesamtenergie

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$\Rightarrow E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + V\Psi$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V\Psi}$$

Im der Quantenmechanik tritt die Schrödinger-Gleichung an die Stelle der Newton'schen Bewegungsgleichung zur Beschreibung der Dynamik eines Systems.

Beispiel: Teilchen mit Masse m bewege sich entlang der Koordinate x in einem Potential $V(x)$.

- Newton'sche Bewegungsgleichung

$$\boxed{\frac{d}{dt} p = F = -\frac{\partial V}{\partial x}}$$

im klassischen Mechanik

- quantenmechanisch gilt für den Erwartungswert des Impulses $\langle p \rangle$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial x} V \right\rangle}$$

$\Rightarrow$ berechne zeitliche Ableitung des Erwartungswertes $\langle \hat{p} \rangle$ und verwende Schrödinger-Gleichung und partielle Integration.

Stationäre Zustände und zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^* \psi \, dx$ eines Teilchens in einem stationären Zustand ist nicht von der Zeit abhängig.

  - Die Wellenfunktion eines solchen Zustands lässt sich schreiben als

Vereinfachung der Berechnung der SGL für nicht explizit von der Zeit abhängige Probleme.

$$\psi(x,t) = u(x) \, e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \qquad (*)$$

$$\psi^* \psi = u^* u$$

und E: Gesamtenergie des Teilchens

$$E = E_{kin} + V = \frac{p^2}{2m} + V$$ für nicht-relativistische Teilchen

- Ein Teilchen ist in einem stationären Zustand, wenn seine Gesamtenergie konstant ist $\left(\frac{\partial}{\partial t} E = 0\right)$. Dies ist in einem zeitunabhängigen Potential $\left(\frac{\partial}{\partial t} V = 0\right)$ der Fall.

- Mit der Wellenfunktion $(*)$ lässt sich die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung vereinfachen.