3. Schrödinger-Gleichung

3.1. Korrespondenzprinzip

Welle-Teilchen Dualismus (Materiewellen):

$$E = \hbar\omega \qquad \text{und} \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Beispiel (freies nichtrelativistisches Teilchen):

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \quad \Rightarrow \quad \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m} \qquad \text{"Dispersionsrelation"}$$

Ebene Welle:

$$\psi(\vec{r},t) \propto e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \qquad \text{komplexe Wellenfunktion}$$

Ableitungen:

$$i\hbar\partial_t\psi = i\hbar(-i\omega)\psi = \hbar\omega\psi = E\psi$$

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi = -i\hbar(i\vec{k})\psi = \hbar\vec{k}\psi = \vec{p}\psi$$

Korrespondenzprinzip (moderne Quantenmechanik):

$$\boxed{\begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar\partial_t(\cdot) \\ \vec{p} &\longrightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}(\cdot) \\ \vec{r} &\longrightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r}\cdot(\cdot) \end{aligned}}$$

Korrespondenzprinzip im Ortsraum

klassische Observable

quantenmechanische Operatoren, die auf $\psi(\vec{r},t)$ wirken

Quantenmechanische Observable: Lineare Abbildungen im Raum der komplexwertigen Funktionen ("Operatoren")

Beispiel (Impulsoperator):

$$\hat{\vec{p}}: \quad \psi(\vec{r},t) \longmapsto \hat{\vec{p}}\,\psi(\vec{r},t) \equiv -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)$$ "Differentialoperator"

Beispiel (Ortsoperator):

$$\hat{\vec{r}}: \quad \psi(\vec{r},t) \longmapsto \hat{\vec{r}}\,\psi(\vec{r},t) = \vec{r}\cdot\psi(\vec{r},t)$$ "Multiplikationsoperator"

Hamilton-Funktion (nichtrelativistisches Teilchen im Potential):

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

Hamilton-Operator:

$$\boxed{H \rightarrow \hat{H} = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}},t) = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}},t)}$$

Korrespondenzprinzip: $H = E \rightarrow \hat{H}\psi(\vec{r},t) = i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t)$

Schrödinger-Gleichung (Ortsraum):

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t\psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t)}$$ (Schrödinger, 1926)

Bemerkung: Kompakte Form $i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi$ gilt auch in anderen Räumen (siehe 3.4.)

Reihenfolge von Operatoren entscheidend:

$$\left(\hat{\vec{r}}_i \hat{\vec{p}}_j - \hat{\vec{p}}_j \hat{\vec{r}}_i\right)\psi = \vec{r}_i\left(-i\hbar\vec{\nabla}_j\right)\psi - \underbrace{\left(-i\hbar\vec{\nabla}_j\right)\vec{r}_i\psi}_{= -i\hbar\,\delta_{ij}\psi + \vec{r}_i(-i\hbar\vec{\nabla}_j)\psi}$$

$$= +i\hbar\,\delta_{ij}\,\psi$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{r}}_i \hat{\vec{p}}_j - \hat{\vec{p}}_j \hat{\vec{r}}_i = i\hbar\,\delta_{ij}\,\mathbb{1}$$

"Kommutator von $\hat{\vec{r}}_i$ und $\hat{\vec{p}}_j$"
(Operator-Identität)

Identitätsoperator: $\mathbb{1}\psi = \psi$

Kommutator (allgemein):

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

für beliebige Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$

Kommutator (Ort und Impuls):

$$\boxed{[\hat{\vec{r}}_i, \hat{\vec{p}}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}\,\mathbb{1}}$$

3.2 Wahrscheinlichkeitsamplitude

Interpretation der Wellenfunktion $\psi(\vec{r},t)$: <u>Wahrscheinlichkeitsamplitude</u>
(Doppelspaltversuch)

Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik:

$|\psi(\vec{r},t)|^2$ beschreibt die <u>Wahrscheinlichkeit</u>, das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ aufzufinden.

Bemerkung:
Wahrscheinlichkeitsinterpretation revolutionär: Keine deterministische Bahnkurve zuordnenbar!

Wahrscheinlichkeitsdichte:

$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$ beschreibt Wahrscheinlichkeitsdichte, falls

(1) $\rho(\vec{r},t) \geq 0$ für alle $\vec{r}$ und t (Positivität)

(2) $\underbrace{\int d^3\vec{r}\, \rho(\vec{r},t)}_{\text{Gesamtwahrscheinlichkeit}} = 1$ für alle t (Normierung)

Für Lösungen der Schrödinger-Gleichung stets erfüllbar:

(1) $\rho = |\psi|^2 = \psi^*\psi \geq 0$ (automatisch)

(2) Falls ψ Lösung der Schrödinger-Gleichung, dann ist auch $\tilde{\psi} = \frac{\psi}{\sqrt{N}}$ mit $N = \int d^3\vec{r}\, \psi^*\psi$ Lösung und erfüllt $\int d^3\vec{r}\, \tilde{\psi}^*\tilde{\psi} = 1$
$\Rightarrow$ definiere $\rho = |\tilde{\psi}|^2$

Zeitevolution Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\partial_t \rho = \partial_t(\psi^*\psi) = \psi^*\partial_t\psi + (\partial_t\psi^*)\psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\Big[\psi^*\underbrace{(i\hbar\partial_t\psi)}_{\overset{SG}{=}\hat{H}\psi} - \underbrace{(-i\hbar\partial_t\psi^*)}_{=(i\hbar\partial_t\psi)^* = (\hat{H}\psi)^*}\psi\Big]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\Big[\psi^*\Big(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V\Big)\psi - \underbrace{\Big(\Big(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V\Big)\psi\Big)^*}_{=\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V\right)\psi^*}\psi\Big]$$

falls $V = V^*$ (reell) "$\hat{H}$ hermitesch"

$$= \frac{1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Big)\Big[\psi^*(\vec{\nabla}^2\psi) - (\vec{\nabla}^2\psi^*)\psi\Big]$$

$$= -\vec{\nabla}\cdot\underbrace{\Big(-\frac{\hbar i}{2m}\Big)\Big[\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi\Big]}_{=:\ \vec{j}}$$

"Wahrscheinlichkeitsstrom"

Kontinuitätsgleichung (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit):

$$\boxed{\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0}$$

mit

$$\boxed{\rho(\vec{r},t) = |\psi|^2 \quad \text{und} \quad \vec{j}(\vec{r},t) = -\frac{i\hbar}{2m}\Big[\psi(\vec{\nabla}\psi^*) - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi\Big]}$$

"Wahrscheinlichkeitsdichte" "Wahrscheinlichkeitsstrom"

Randbedingung:

Strom $\vec{j}$ sollte an Oberfläche des Systems (im Unendlichen) verschwinden

Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit:

$$\partial_t \int d^3\vec{r}\, \rho = -\int d^3\vec{r}\, \vec{\nabla}\cdot\vec{j} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Satz von} \\ \text{Gauß}}}{=} -\oint d\vec{f}\cdot\vec{j} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Randbedingung}}}{=} 0$$

Erhaltung der Normierung:

Falls $\int d^3\vec{r}\, \psi^*\psi = 1$ zur Zeit t $\Rightarrow$ $\int d^3\vec{r}\, \psi^*\psi = 1$ für alle t (2)

3.3. Stationäre Schrödinger-Gleichung

Systeme ohne äußere Störung : $V(\vec{r},t) = V(\vec{r})$ zeitunabhängig

Separationsansatz:

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

$$\overset{SG}{\Rightarrow} \quad \hat{H}\big(\psi(\vec{r})f(t)\big) = i\hbar\partial_t\big(\psi(\vec{r})f(t)\big)$$

$$\overset{V=V(\vec{r})}{\Rightarrow} \quad \underbrace{\frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}}_{\text{hängt nur von } \vec{r} \text{ ab}} = i\hbar \underbrace{\frac{\partial_t f(t)}{f(t)}}_{\text{hängt nur von } t \text{ ab}} =: E = \text{const.}$$

$$\Rightarrow \quad f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \qquad (\text{o.B.d.A.})$$

Stationäre Schrödingergleichung:

$$\boxed{\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})}$$

Zeitabhängigkeit:

$$\boxed{\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}}$$

3.4. Schrödingergleichung im Impulsraum

Fourier-Transformation:

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\, \psi(\vec{p},t) \qquad \text{"Ortsraumwellenfunktion"}$$

$$\psi(\vec{p},t) = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\, \psi(\vec{r},t) \qquad \text{"Impulsraumwellenfunktion"}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\, i\hbar\partial_t \psi(\vec{p},t) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r},t)\right) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\, \psi(\vec{p},t)}_{= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r},t)\right) e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\, \psi(\vec{p},t)}$$

$$\Big|\, e^{-i\vec{p}'\vec{r}/\hbar}(\cdot) \quad \Big|\int d^3\vec{r}\,(\cdot)$$

$$\int d^3\vec{r} \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i(\vec{p}-\vec{p}\,')\cdot\vec{r}/\hbar}\, i\hbar\partial_t \psi(\vec{p},t)$$

$$= \int d^3\vec{r} \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{r}/\hbar} \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r},t)\right) \psi(\vec{p},t)$$

Es gilt

(a) $$\int d^3\vec{r}\, e^{i(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{r}/\hbar} = (2\pi\hbar)^3\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$$ (Fourier-Transformation der Delta-Funktion)

(b) $$\int d^3\vec{r}\, V(\vec{r},t)\, e^{i(\vec{p}-\vec{p}\,')\cdot\vec{r}/\hbar} = \int d\vec{r}\, \underbrace{V(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}\,'},t)}_{\substack{\text{Operator-Funktion} \\ \text{von } i\hbar\vec{\nabla}_{p'} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}\,'}}}\, e^{i(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{r}/\hbar}$$

28.10.19

z.B. $V(\vec{r}) = \frac{m\omega^2}{2}\vec{r}^{\,2} \Rightarrow V(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}\,'}) = \frac{m\omega^2}{2}(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}\,'})^2$

$$\overset{(a)}{=} V(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}\,'},t)\, (2\pi\hbar)^3\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$$

$$\Rightarrow \int d^3\vec{p}\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\, i\hbar\partial_t\psi(\vec{p},t) = \int d^3\vec{p}\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\, \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\psi(\vec{p},t)$$
$$+ V(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}\,'},t) \int d^3\vec{p}\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\, \psi(\vec{p},t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\,\partial_t\psi(\vec{p},t) = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}},t)\right)\psi(\vec{p},t)}$$ Schrödinger-Gleichung im Impulsraum

Korrespondenzprinzip im Impulsraum:

$$\boxed{\begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar\partial_t \\ \vec{p} &\longrightarrow \hat{\vec{p}} \equiv \vec{p}\cdot(\cdot) \\ \vec{r} &\longrightarrow \hat{\vec{r}} \equiv i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}(\cdot) \end{aligned}}$$

"Multiplikationsoperator"

"Differentialoperator"

Operator "Darstellung" des Operators im Impulsraum

Schlussfolgerung:

Die Darstellung eines Operators hängt von der (den jeweiligen Raum aufspannenden) Basis ab

Bemerkung:

Messbare Größen sind unabhängig von der Darstellung

Beispiel (Gesamtaufenthaltswahrscheinlichkeit):

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \\ &= \int d^3\vec{r} \int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\int\frac{d^3\vec{p}\,'}{(2\pi\hbar)^3}\; e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\;\psi^*(\vec{p},t)\; e^{i\vec{p}\,'\cdot\vec{r}/\hbar}\;\psi(\vec{p}\,',t) \\ &= \int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3\vec{p}\,'\;\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\;\psi^*(\vec{p},t)\psi(\vec{p}\,',t) \\ &= \int\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\;|\psi(\vec{p},t)|^2 \qquad \text{(Satz von Parseval)} \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum

3.5. Freie Materiewellen

Schrödinger-Gleichung für freies Teilchen ($V=0$):

$$i\hbar\,\partial_t \psi = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\psi$$

Lösung:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_{\vec{k}} t)} \qquad \text{mit} \quad \omega_{\vec{k}} = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} \qquad \text{(ebene Welle)}$$

und $\vec{k}$ beliebig

A: komplexe Amplitude (Normierungskonstante)

Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$|\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)|^2 = |A|^2 \left| e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_{\vec{k}} t)} \right|^2 = |A|^2$$

Gesamtwahrscheinlichkeit einer einzelnen ebenen Welle:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\; |\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)|^2 = |A|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\; 1 \to \infty$$

"$\psi_{\vec{k}}$ ist nicht quadratintegral"

Interpretation:

$\psi_{\vec{k}}$ beschreibt nicht ein einzelnes Teilchen, sondern einen Teilchenstrom

Wahrscheinlichkeitsstrom:

$$\vec{j}_{\vec{k}} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*_{\vec{k}}(\vec{\nabla}\psi_{\vec{k}}) - (\vec{\nabla}\psi^*_{\vec{k}})\psi_{\vec{k}}\right)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2\left(i\vec{k} - (-i\vec{k})\right)$$

$$= |A|^2 \underbrace{\frac{\hbar\vec{k}}{m}}_{=\vec{p}/m = \vec{v}}$$

$$= |A|^2 \, \vec{v}$$

Teilchendichte   Teilchengeschwindigkeit

$\Rightarrow$ $\psi^*_{\vec{k}}(\vec{r},t)\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)$ beschreibt mittlere Teilchendichte

Bemerkung:

Einzelne freie Teilchen werden durch (normierbare) Wellenpakete

$$\psi(\vec{r},t) = \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\psi(\vec{p})e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$$ (Superposition ebener Wellen)

beschrieben.

Beispiel (Gauß'sches Wellenpaket in einer Dimension):

$$\psi(p) = \sqrt{2\sigma}\,(2\pi)^{1/4}\, e^{-\sigma^2\left(\frac{p-p_0}{\hbar}\right)^2} \quad \Rightarrow \psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,(2\pi)^{1/4}}\, e^{ip_0x/\hbar}\, e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$$

mit $\int dx\, \psi^*(x,t)\psi(x,t) = 1$ normiert

[Übungsaufgabe 4.1]

3.6. Erwartungswerte

Erwartungswert einer ortsabhängigen Observable $A(\hat{\vec{r}})$ zum Zeitpunkt t:

$$\langle A(\hat{\vec{r}})\rangle_t = \int d^3\vec{r}\, \psi^*(\vec{r},t)\, A(\hat{\vec{r}})\, \psi(\vec{r},t) = \int d^3\vec{r}\, A(\vec{r})\, |\psi(\vec{r},t)|^2$$

"Erwartungswert von $A(\hat{\vec{r}})$ im Zustand $\psi(\vec{r},t)$"

Interpretation:

$\langle A(\hat{\vec{r}})\rangle_t$ ist der Mittelwert von vielen Messungen der Größe $A(\vec{r})$ an identisch präparierten (und durch $\psi(\vec{r},t)$ beschriebenen) Systemen

Erwartungswert einer impulsabhängigen Observable $B(\hat{\vec{p}})$:

$$\langle B(\hat{\vec{p}})\rangle_t = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \psi^*(\vec{p},t)\, B(\hat{\vec{p}})\, \psi(\vec{p},t) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, B(\vec{p})\, |\psi(\vec{p},t)|^2$$

Berechnung von $\langle B(\hat{\vec{p}})\rangle_t$ in Ortsdarstellung:

$$\langle B(\hat{\vec{p}})\rangle_t = \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}\,' \underbrace{\int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, B(\vec{p})\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')/\hbar}}\ \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r}\,',t)$$

$$= \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \underset{\text{Operator-Funktion}}{B(-i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}})}\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')/\hbar} = B(-i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}})\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

$$\stackrel{\downarrow}{=} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}\,'\, \psi^*(\vec{r},t) \Big(B(-i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}})\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \Big)\, \psi(\vec{r}\,',t)$$

$$\stackrel{\downarrow}{=} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}\,' \left(B(+i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}}) \psi^*(\vec{r},t) \right) \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \psi(\vec{r}\,',t)$$

$$= \int d^3\vec{r} \left(B(+i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}}) \psi^*(\vec{r},t) \right) \psi(\vec{r},t)$$

$$= \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t) \; B(-i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}}) \psi(\vec{r},t)$$

Analog:

$$\langle A(\hat{\vec{r}}) \rangle_t = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \psi^*(\vec{p},t) \, A(i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \psi(\vec{p},t)$$

Bemerkung:

Der Erwartungswert einer Observable $\hat{A}$ kann als Skalarprodukt im Vektorraum der Wellenfunktionen ("Hilbert-Raum") aufgefasst werden:

$$\langle \hat{A} \rangle = (\psi, A\psi) \qquad \text{wobei} \quad (\psi,\chi) := \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t) \chi(\vec{r},t)$$

Physiker schreiben dies so:

$$\langle \hat{A} \rangle = \underset{\text{"Bra"}}{\langle \psi |} \underbrace{A | \psi \rangle}_{\equiv \underset{\text{"Ket"}}{|\chi\rangle}} \qquad \text{wobei} \quad \langle \psi | \chi \rangle := \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t) \chi(\vec{r},t)$$

"Bra-Ket"-Notation

3.7. Schwankungen

Quadratische Schwankung einer Messgröße (mittlere Breite der Verteilung):

$$\Delta A := \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$$

Es folgt:

$$(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle$$

$$= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \qquad > 0 \quad \text{falls} \quad \langle \hat{A}^2 \rangle > \langle \hat{A} \rangle^2$$

Beispiel (Gauß'sches Wellenpaket):

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma}} \, e^{i p_0 x / \hbar} \, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

Schwankungen: $\Delta x = \sigma$ und $\Delta p = \frac{\hbar}{2\sigma}$ [Übungsaufgabe 5.1]

Interpretation: Lokalisation im Ortsraum ($\Delta x \to 0$) führt zu Delokalisation im Impulsraum ($\Delta p \to \infty$) und umgekehrt

Unschärfeprodukt:

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}} \quad \text{für das Gauß'sche Wellenpaket}$$

3.8. Orts-Impuls-Unschärferelation

Ziel: Untere Schranke für Unschärfeprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$ für beliebige $\psi(x)$

Hilfsfunktion:

$$I(\lambda) := \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| (\hat{x} - \underbrace{\langle \hat{x} \rangle}_{=\int dx'\, \psi^*(x')\, x'\, \psi(x')})\psi(x) + i\lambda(\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)\psi(x) \right|^2 \geq 0$$

$$= \int dx \left| (x - \langle \hat{x} \rangle)\psi(x) + i\lambda(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi(x) \right|^2$$

$$= \int dx \Big\{ \psi^* (x - \langle \hat{x} \rangle)^2 \psi + \psi^* (x - \langle \hat{x} \rangle)\, i\lambda(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi$$

$$- i\lambda \left[(+i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi^*\right]\left[(x - \langle \hat{x} \rangle)\psi + i\lambda(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi\right] \Big\}$$

$$= \int dx \Big\{ \psi^* (x - \langle \hat{x} \rangle)^2 \psi + i\lambda\, \psi^*(x - \langle \hat{x} \rangle)(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi$$

partielle Integration

$$- i\lambda\, \psi^* (-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)(x - \langle \hat{x} \rangle)\psi + \lambda^2 \psi^* (-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)^2 \psi \Big\}$$

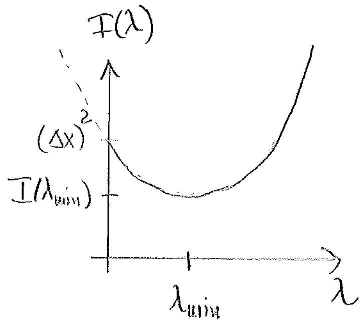
$$= \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle + \cancelto{0}{i\lambda \int dx\, \psi^* (x - \langle \hat{x} \rangle)(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi}$$

$$- i\lambda \int dx\, \psi^* \left[-i\hbar\partial_x (\underbrace{x}_{1} - \underbrace{\langle \hat{x} \rangle}_{0})\right]\psi \; \cancelto{0}{- i\lambda \int dx\, \psi^* (x - \langle \hat{x} \rangle)(-i\hbar\partial_x - \langle \hat{p} \rangle)\psi}$$

$$+ \lambda^2 \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle$$

$$= (\Delta x)^2 - i\lambda(-i\hbar)\int dx\, \psi^*\psi + \lambda^2 (\Delta p)^2$$

$$= (\Delta x)^2 - \lambda\hbar + \lambda^2 (\Delta p)^2$$



Minimum von $I(\lambda)$:

$$\frac{dI}{d\lambda} = -\hbar + 2\lambda(\Delta p)^2 \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \lambda_{min} = \frac{\hbar}{2(\Delta p)^2}$$

$$\Rightarrow I(\lambda_{min}) = (\Delta x)^2 - \frac{\hbar^2}{2(\Delta p)^2} + \frac{\hbar^2}{4(\Delta p)^2}$$

$$= (\Delta x)^2 - \frac{\hbar^2}{4(\Delta p)^2} \overset{!}{\geq} 0$$

Daraus folgt:

$$\boxed{(\Delta x)\cdot(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Heisenberg'sche Unschärferelation für Ort und Impuls

Bemerkungen:

- Die Unschärferelation sagt aus, dass es unmöglich ist, ein Quantensystem so zu präparieren, dass Ort und Impuls gleichzeitig eindeutig vorhersagbar sind.
- Anschaulich: Ort und Impuls lassen sich nicht gleichzeitig scharf messen (Diese Interpretation ist Gegenstand aktueller Forschung!)
- Gauß'sches Wellenpaket erfüllt untere Schranke: $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
- Formaler Grund für Unschärfe: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0$ [Kap. 6.3]