"Rateweg" zur QM (Einteilchenproblem)

Korrespondenzmäßiger Anschluß an klassische Materiefeldtheorie

de Broglie – ~~Schrödingersche Materiefeldgleichung~~

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

Schrödinger= gleichung $x \in \mathbb{R}$

AB : $\psi(x,t_0)$ (woher? PRÄPARATION)

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x,t_0)|^2 dx = \cancel{M}\ 1$$

ψ ~~Materiefeldstärke~~ ~~(Materieamplitudenfunktion)~~ Zustandsfunktion (historisch: Wellenfunktion)

$\cancel{\varrho}\,W(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ Materiedichte (Massendichte) Antreff-Wa-Dichte (Born)

$\vec{j}(x,t)$ ~~Materiestromdichte~~ Antreff-Wa-Stromdichte

Teilchenort $\mathcal{X}$: Meßwertspektrum $x \in \mathbb{R}$

$$\psi(x,t) \longrightarrow \text{Wa-Dichte } W(x,t) = |\psi(x,t)|^2$$

Mittelwert: $\bar{x}(t) = \int_{\mathbb{R}} x\, W(x,t)\,dx$

Teilchenimpuls $\mathcal{P}$: Meßwertspektrum $p \in \mathbb{R}$ (Annahme)

$$\psi(x,t) \longrightarrow \text{Wa-Dichte } W(p,t) = \,?$$ Frage 1

Mittelwert: $\bar{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} p\, W(p,t)\,dp$

Korrespondenzmäßiger Anschluß an klassische Teilchentheorie

$$\cancel{\frac{dx(t)}{dt} = \frac{p(t)}{m}}$$

$$\cancel{\frac{dp(t)}{dt} = K(x(t))}$$

$$\text{AB}: \cancel{x(t_0), p(t_0)}$$

"Wunsch": $\boxed{\frac{d\bar{x}(t)}{dt} = \frac{\bar{p}(t)}{m}}$

Ist erfüllbar und dient zum Erraten der Antwort auf Frage 1.

Frage 2: Unter welchen Voraussetzungen für das Kraftgesetz gilt dann

$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = K(\bar{x}(t)) \quad ?$$

Bemerkung: Allgemein kann dies nicht gelten, d.h. die Mittelwerte können i.a. nicht die klassischen Beziehungen erfüllen. ●

Antwort auf Frage 2 erst viel später (Abschnitt 4.12).

Zu Frage 1:

$$\overline{x}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, x\, W(x,t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, x\, |\psi(x,t)|^2$$

$$\frac{d\overline{x}(t)}{dt} = \int_{\mathbb{R}} dx\, x\, \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2}$$

Kontinuitätsgl.:

$$-\frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\frac{d\overline{x}(t)}{dt} = -\frac{\hbar}{2mi}\int_{\mathbb{R}} dx\, x\, \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Partielle Integration: $\int_{\mathbb{R}} u\,dv = uv\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} v\,du$

$$u = x \qquad dv = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx$$

$$du = dx \qquad v = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

$$\frac{d\overline{x}(t)}{dt} = -\frac{\hbar}{2mi}\, x\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$ Annahme: $\varnothing$

$$+\frac{\hbar}{2mi}\int_{\mathbb{R}} dx\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\frac{d\overline{x}(t)}{dt} = \frac{\hbar}{2mi}\int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{2mi}\underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx\, \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}}_{\text{"Randterm"} - \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

Annahme: $\varnothing$

$$\frac{d\bar{x}(t)}{dt} = \frac{\hbar}{mi}\int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x}$$

"Wunsch"

$$= \frac{1}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right) \overset{!}{=} \frac{\bar{p}(t)}{m}$$

"Wunsch" erfüllt, wofern man interpretiert:

$$\boxed{\bar{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)}$$

Feldimpuls in dB-S-MFTh.!

Damit $\psi(x,t) \xrightarrow{?} \bar{p}(t)$, aber noch nicht

$\psi(x,t) \xrightarrow{?} W(p,t)$ beantwortet.

$$\bar{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right) = \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, W(p,t)$$

?

Integraltransformation
(welche?)

Vermutung: Fouriersche Integraltransformation

$$\tilde{u}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-ikx} u(x)$$

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dk\, e^{ikx} \tilde{u}(k)$$

Grund: $-i\frac{\partial}{\partial x}$ holt Faktor k "herunter"

Mathematik: Fourierintegral

$$\tilde{u}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-ikx} u(x) \quad , \quad u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dk\, e^{ikx} \tilde{u}(k)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{i(k'-k'')x} = \delta(k'-k'')$$ "Orthogonalität" ("Orthonormalität")

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dk\, e^{ik(x'-x'')} = \delta(x'-x'')$$ "Vollständigkeit" der Fourierschen Funktionen $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$

Anwendung in QM: $p = \hbar k$ gesetzt (damit p Dimension eines Impulses) und neu "normiert" (δ-Funktion in $p'-p''$ statt in $k'-k''$)

$$\tilde{u}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} u(x) \quad , \quad u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp\, e^{\frac{i}{\hbar}px} \tilde{u}(p)$$

$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\qquad p$

$\hbar \cdot |$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p'')x} = \delta(p'-p'')$$

Beachte: $\delta(\alpha\xi) = \frac{\delta(\xi)}{|\alpha|}$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dp\, e^{\frac{i}{\hbar}p(x'-x'')} = \delta(x'-x'')$$

$$\overline{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\right) = \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, W(p,t)$$

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, \tilde{\psi}(p,t)}$$

$$\boxed{\tilde{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, \psi(x,t)}$$

t Parameter (später werden wir oft $\psi_t(x)$, $\tilde{\psi}_t(p)$ schreiben, um dies zu betonen)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, \tilde{\psi}(p,t)$$

$$-i\hbar \frac{i}{\hbar} p = p$$

"En passent" fällt uns auf:

1) Der Differentialoperator $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ "hat etwas mit dem Teilchenimpuls zu tun"

2) $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\, e^{\frac{i}{\hbar}px} = p\, e^{\frac{i}{\hbar}px}$, d.h. $e^{\frac{i}{\hbar}px}$ ist Eigenfunktion (EF) dieses Differentialoperators

$$\bar{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\right) = \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, W(p,t)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, \tilde{\psi}(p,t)$$

$$\psi^*(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp'\, e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\, \tilde{\psi}^*(p',t)$$

$$\bar{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, \tilde{\psi}(p,t) \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{\psi}^*(p',t) \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}}_{\delta(p-p')} = \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, |\tilde{\psi}(p,t)|^2$$

Legt Interpretation

$$\boxed{W(p,t) = |\tilde{\psi}(p,t)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, \psi(x,t) \right|^2}$$

nahe, womit Frage 1

$$\psi(x,t) \xrightarrow{?} W(p,t)$$

beantwortet ist.

Diese Interpretation ist nur möglich, wenn $\int_{\mathbb{R}} dp\, |\tilde{\psi}(p,t)|^2 = 1$ gilt:

$$1 = \int_{\mathbb{R}} dx\, \overbrace{|\psi(x,t)|^2}^{W(x,t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\, \psi(x,t)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, \tilde{\psi}(p,t) \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{\psi}^*(p',t) \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}}_{\delta(p-p')} = \int_{\mathbb{R}} dp\, \overbrace{|\tilde{\psi}(p,t)|^2}^{W(p,t) \text{ o.k.}} \quad \checkmark$$

Potentielle Energie $\mathcal{V}$ des Teilchens: Meßwertspektrum $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$

(Annahme)

z.B. $\mathbb{R}_0^+$ bei $V(x) = \frac{m\omega_0^2}{2} x^2$

Wa-Verteilung $W(V,t)$ ergibt sich dann elementar aus $W(x,t)$:

$W(V,t)\, dV = W(x,t)\, dx$

$W(V,t) = W(x(V),t)\, \frac{dx(V)}{dV}$

Mittelwert:

$$\boxed{\bar{V}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, V(x)\, \overbrace{W(x,t)}^{|\psi(x,t)|^2} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\, V(x)\, \psi(x,t)}$$

pot. Energie des Materie=feldes in dB-S-MFTh.!

$$= \int_{\sigma(\mathcal{V})} dV\, V\, W(V,t)$$ ----- interessiert uns hier aber nicht

Kinetische Energie $\mathcal{T}$ des Teilchens: Meßwertspektrum $T(p) = \frac{p^2}{2m}$, $p \in \mathbb{R}$,

d.h. $T \in \mathbb{R}_0^+$ (Annahme)

Wa-Verteilung $W(T,t)$ ergibt sich dann elementar aus $W(p,t)$: $W(T,t)\,dT = W(p,t)\,dp$

$$W(T,t) = W(p(T),t)\,\frac{dp(T)}{dT} = \dots$$

Mittelwert:

$$\boxed{\overline{T}(t) = \int_{\mathbb{R}} dp\,\frac{p^2}{2m}\,W(p,t) = \int_{\mathbb{R}} dp\,\frac{p^2}{2m}\,|\tilde{\psi}(p,t)|^2}$$

$$= \int_{\mathbb{R}_0^+} dT\,T\,W(T,t)$$ ----- interessiert uns hier nicht

Zeige selbst:

$$\boxed{\overline{T}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\,\psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right)}$$

Erinnerung:

$$\overline{p}(t) = \int_{\mathbb{R}} dp\,p\,|\tilde{\psi}(p,t)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx\,\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)$$

Kin. Energie des Materiefeldes in dB-S-MFTh.!

Beachte dabei:

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\underbrace{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{\frac{i}{\hbar}px}}_{p\,e^{\frac{i}{\hbar}px}} = \underline{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{\frac{i}{\hbar}px} = p^2\,e^{\frac{i}{\hbar}px}} \quad \Big|\cdot\frac{1}{2m}$$

Gesamtenergie $\mathcal{H}$ des Teilchens: Meßwertspektrum? Wa-Verteilung? Mittelwert?

NEUE SITUATION WEGEN "NICHTVERTRÄGLICHKEIT" VON $\mathcal{X}$ UND $\mathcal{P}$ UND DAMIT VON $\mathcal{V}$ UND $\mathcal{T}$!

Klassisch: $H(x,p) = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{T(p)} + V(x)$

z.B.: harmon. Oszillator

Möglichkeiten der Gesamtenergiemessung — klassisch: $\mathbb{R}_0^+$; qm: $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $n \in \mathbb{N}_0$!

klass. Teilchentheorie:

$$\cancel{E(t) = T(t) + V(t) = T(t_0) + V(t_0) = E(t_0)}$$

"Versuch" $\overline{E}(t) = \overline{T}(t) + \overline{V}(t)$ experimentelle Überprüfung?

Theoretische Stützen:

$$\overline{E}(t) = \overline{T}(t) + \overline{V}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\psi(x,t)$$

1) Integrand stellt in klassischer Materiefeldtheorie die Feldenergiedichte und $\overline{E}(t)$ die Gesamtenergie der Materie dar (Andere "Normierung" von ψ!)

2) $\frac{d\bar{E}(t)}{dt} = 0$, d.h. $\boxed{\bar{E}(t) = \bar{T}(t) + \bar{V}(t) = \bar{T}(t_0) + \bar{V}(t_0) = \bar{E}(t_0)}$

Energieerhaltung in der QM (Auch in der klass. Feldtheorie!)

experimentelle Überprüfung?

Beweis:

$$\frac{d\bar{E}(t)}{dt} = \int_{\mathbb{R}} dx \, \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi + \int_{\mathbb{R}} dx \, \psi^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

zweimalige partielle Integration im 1. Integral gibt

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \frac{\partial \psi}{\partial t} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} \psi^* + \emptyset + \emptyset$$

$$\frac{d\bar{E}(t)}{dt} = \int_{\mathbb{R}} dx \, \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi}_{\text{SG: } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}} + \int_{\mathbb{R}} dx \, \frac{\partial \psi}{\partial t} \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi^*}_{-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}}$$

$$= 0 \checkmark$$

Gesamtenergie $\mathcal{E}$ des Teilchens:

Meßwertspektrum? (I.a. verschieden vom klassischen!) – – – Frage 3

Wa-Verteilung? – – – Frage 4

Mittelwert:

$$\boxed{\bar{E}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x,t)}$$

$$= \forall \quad \left(\text{z.B. } \sum_{n=0}^{\infty} E_n W_n(t) \text{ für harmon. Oszillator}\right)$$

Um Anhaltspunkte für die Beantwortung der Fragen 3,4 zu finden, lassen wir die bisherigen "Ergebnisse" Revue passieren!

$$\underline{\bar{x}(t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, x\, |\psi(x,t)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\, \underline{\underline{x}}\, \psi(x,t)$$

$$\underline{\bar{p}(t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \underline{\underline{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)}} \psi(x,t)$$

$$\underline{\bar{V}(t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\, \underline{\underline{V(x)}}\, \psi(x,t)$$

OPERATOREN!

$$\underline{\bar{T}(t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \underline{\underline{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)}} \psi(x,t)$$

$$\underline{\bar{E}(t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t) \underline{\underline{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)}} \psi(x,t)$$

$\underline{\underline{\quad}}$ ... multiplikativer Operator oder Differentialoperator oder Summe von solchen Operatoren

Allgemeine Struktur:

Meßgröße $\mathfrak{A}$ $\longleftrightarrow$ Operator $\hat{A}$

Mittelwert:

$$\bar{A}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^*(x,t)\, \hat{A}\, \psi(x,t)$$

$\mathfrak{A}$	$\hat{A}$	
$\mathfrak{X}$	$\hat{x} = x$	Ortsoperator
$\mathfrak{P}$	$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	Impulsoperator
$\mathfrak{V}$	$\hat{V} = V(x)$	Operator der potentiellen Energie
$\mathfrak{T}$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	Operator der kinetischen Energie
$\mathfrak{H}$	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$	Hamilton-operator (Operator der Gesamtenergie)

Das war die "schlampige" Physikerschreibweise.

Mathematisch sauber wäre:

$$\psi(x,t) \longrightarrow \psi_t(x)$$

Meßgröße $\mathfrak{A} \longleftrightarrow$ Operator $\hat{A}$

Mittelwert:

$$\bar{A}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi_t^*(x) (\hat{A}\psi_t)(x)$$

$\mathfrak{A}$	$\hat{A}$
$\mathfrak{X}$	$\hat{x}$: $\quad (\hat{x}f)(x) = x f(x)$
$\mathfrak{P}$	$\hat{p}$: $\quad (\hat{p}f)(x) = -i\hbar f'(x)$
$\mathfrak{V}$	$\hat{V}$: $\quad \hat{V} = V(\hat{x})$, d.h. $(\hat{V}f)(x) = V(x) f(x)$
$\mathfrak{T}$	$\hat{T}$: $\quad \hat{T} = T(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, d.h. $(\hat{T}f)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} f''(x)$
$\mathfrak{H}$	$\hat{H}$: $\quad \hat{H} = H(\hat{x},\hat{p}) = T(\hat{p}) + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, d.h. $(\hat{H}f)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} f''(x) + V(x) f(x)$

fundamentale Observablen

$\mathfrak{X}, \mathfrak{P}$ "fundamentale Observablen" $\longleftrightarrow$ Operatoren $\hat{x}, \hat{p}$

$\mathfrak{A}$: klassisch $A(x,p)$

qm $\hat{A} = A(\hat{x},\hat{p})$

korrespondenzmäßiger Übersetzungsmechanismus ("Korrespondenzregeln", "Übersetzungsregeln")

Probleme später!

Zwei Dinge fallen auf:

1) SG kann als

$$\boxed{\hat{H}\psi_t = i\hbar \frac{d\psi_t}{dt}}$$

geschrieben werden.

Klass. Mechanik: $H = H(x,p)$ bestimmt die Dynamik... HAMILTONFUNKTION

QM: $\hat{H} = H(\hat{x},\hat{p})$ bestimmt die "Dynamik"... HAMILTONOPERATOR

2) Nichtverträgliche Meßgrößen werden durch "nichtvertauschbare" Operatoren beschrieben:

z.B. $\mathcal{X}, \mathcal{P}$: $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$

("schlampig": $x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \neq -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x$

korrekt: $\underbrace{x\left(-i\hbar f'(x)\right)}_{(\hat{x}\hat{p})f} \neq -i\hbar\left(x f(x)\right)' \overset{(\hat{p}\hat{x})f}{=}$

$[\hat{x},\hat{p}] \equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\hat{1} \Longleftarrow -i\hbar f(x) \underbrace{- i\hbar x f'(x)}_{(\hat{x}\hat{p})f}$)

Verträgliche Meßgrößen werden durch "vertauschbare" Operatoren beschrieben:

z.B.: $\mathcal{P}, \mathcal{T}$: $\hat{p}\underbrace{\hat{T}}_{\frac{\hat{p}^3}{2m}} = \underbrace{\hat{T}}_{\frac{\hat{p}^3}{2m}}\hat{p}$ bzw. $[\hat{p},\hat{T}] = \hat{0}$

Zurück zu den Fragen 3,4 !

Gesamtenergie $\mathcal{E}$ $\longleftrightarrow$ Operator $\hat{H}$ (Hamiltonoperator):

Meßwertspektrum ? ---- Frage 3

Wa- Verteilung ? ----- Frage 4

Mittelwert:

$$\boxed{\bar{E}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi_t^*(x) (\hat{H}\psi_t)(x)}$$

WIR ORIENTIEREN UNS DARAN, WIE DIE "GESCHICHTE" BEIM IMPULS WAR!

Teilchenimpuls $\mathcal{P}$ $\longleftrightarrow$ Impulsoperator $\hat{p}$:

EWP von $\hat{p}$: $\boxed{\hat{p}u = \lambda u \quad , \; u \neq 0}$

EW-Parameter

Lösen des EWP:

$$-i\hbar u'(x) = \lambda u(x)$$

Dgl. mit getrennten Variablen

Eine für $x \to \pm\infty$ reguläre (endliche) Lsg. gibt es für beliebige $\lambda \in \mathbb{R}$, die zu einem solchen λ (EW) gehörige Lsg. (EF) lautet

$$u_\lambda(x) = C_\lambda e^{\frac{i}{\hbar}\lambda x}$$

EW reell !

Meßwertspektrum von $\mathcal{P}$:

$$\boxed{\text{EW-Spektrum von } \hat{p} \ (\sigma(\hat{p}) \text{ bezeichnet}) \ (\text{d.h. Menge der EW}) = \text{Meßwertspektrum von } \mathcal{P} \ (\text{d.h. Menge der möglichen Meßwerte})}$$

Deshalb statt $\lambda \to \underbrace{p'}_{\text{(bisher } p)}$ geschrieben!

Lösung des EWP von $\hat{p}$: p' EW, $u_{p'}$ zugehörige Impuls-EF

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{p}\, u_{p'} = p' u_{p'} \quad , \quad \underbrace{p'}_{\text{EW}} \in \sigma(\hat{p}) = \mathbb{R} \\ \underbrace{u_{p'}(x)}_{\text{EF}} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x} \end{array}}$$

Wahl von $C_{p'}$ wurde so getroffen, daß

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, u_{p'}^*(x)\, u_{p''}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{\frac{i}{\hbar}(p''-p')x}$$

$$= \delta(p'-p'') \qquad (\text{"Orthonormalität"})$$

EF zu verschiedenen EW "orthogonal"!

gilt.

Bemerkung: $\int_{\mathbb{R}} dx\, |u_p(x)|^2 \nexists$.

EF $\{u_{p'},\ p' \in \mathbb{R}\}$ bilden vollständigen Satz von Entwicklungsfunktionen für Funktionen $f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$. (In welchem mathematischen Sinn wird später besprochen.)

Entwicklungssatz (Fouriertheorem): $f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ "beliebig"

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dp' \, \underbrace{\tilde{f}(p')}_{\text{Entwicklungs-"Koeffizient" (Fouriertransformierte von } f)} \underbrace{u_{p'}(x)}_{\text{Entwicklungsfunktion}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp' \, e^{\frac{i}{\hbar}p'x} \tilde{f}(p')$$

Integration über $\sigma(\hat{p})$

mit

$$\tilde{f}(p') = \int_{\mathbb{R}} dx \, u^*_{p'}(x) f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \, e^{-\frac{i}{\hbar}p'x} f(x)$$

Wa-Verteilung bzgl. $\mathcal{P}$:

Wa-Dichte $W(p',t)$ = Absolutquadrat des "Entwicklungskoeffizienten" $\tilde{\psi}(p',t) \equiv \tilde{\psi}_t(p')$ der ZF $\psi(x,t) \equiv \psi_t(x)$ in der "Entwicklung" nach den (wie oben "normierten") Impuls-EF $u_{p'}(x)$.

$$\psi_t(x) = \int_{\mathbb{R}} dp' \, \underbrace{\tilde{\psi}_t(p')}\, u_{p'}(x)$$

$$\tilde{\psi}_t(p') = \int_{\mathbb{R}} dx \, u^*_{p'}(x) \psi_t(x)$$

$$W(p',t) = |\tilde{\psi}_t(p')|^2 = |\tilde{\psi}(p',t)|^2$$

Bevor wir probieren, ob dieser "Schimmel" auch bei der Gesamtenergie $\mathcal{E}$ "funktioniert" (Fragen 3,4!), probieren wir, ob er beim Teilchenort $\mathcal{X}$ "funktioniert" ("Schimmel" bei $\mathcal{P}$ "Zufall" oder allgemeine Struktur gefunden?)

Teilchenort $\mathcal{X} \longleftrightarrow$ Ortsoperator $\hat{x}$:

EWP von $\hat{x}$: $\boxed{\hat{x}u = \lambda u \quad , \quad u \neq 0}$

Lösen des EWP:

$$(\hat{x}u)(x) = x\,u(x) = \lambda u(x)$$

$$(x-\lambda)\,u(x) = 0 \qquad , \quad u(x) \not\equiv 0$$

"Pathologisch", besitzt Lsg. nur im Sinne der Distributionentheorie (verallgemeinerte Fktn.):

In diesem Sinne gibt es für beliebiges $\lambda \in \mathbb{R}$ (EW) eine Lösung (EF), und zwar

$$u_\lambda(x) = C_\lambda\, \delta(x-\lambda)$$

Erinnerung:

$$x\,\delta(x) = 0 \ ,$$

d.h.

$$(x-\lambda)\,\delta(x-\lambda) = 0 \ .$$

Lösung des EWP von $\hat{X}$:

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{X}\, u_{x'} = x' u_{x'} \quad , \quad \underset{\text{EW}}{x'} \in \sigma(\hat{X}) = \mathbb{R} \\ \\ u_{x'}(x) = \underbrace{\delta(x-x')}_{\text{"EF"}} \end{array}}$$

Wahl von $C_{x'}$ wurde so getroffen, daß

$$\underline{\underline{\int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{x'}(x)\, u_{x''}(x)}} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \delta(x-x')\,\delta(x-x'')$$

$$= \underline{\underline{\delta(x'-x'')}} \qquad (\text{"Orthonormalität"})$$

gilt.

Bemerkung: $|u_{x'}(x)|^2$ nicht einmal definiert.

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{EW-Spektrum } \sigma(\hat{X}) = \mathbb{R} \text{ von } \hat{X} = \\ \text{Meßwertspektrum von } \mathfrak{X}\end{array}}$$

"EF" $\{u_{x'},\, x' \in \mathbb{R}\}$ bilden vollständigen Satz von "Entwicklungsfunktionen" für Funktionen $f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$. (Wenn auch mathematisch "pathologisch" im Sinne der klassischen Analysis.)

"Entwicklungssatz" (δ-Funktionsformalismus):

$$\underline{f(x) = \int_{\mathbb{R}} dx'\, f(x')\, u_{x'}(x)} = \int_{\mathbb{R}} dx'\, \delta(x-x')\, f(x')$$

Integration über $\sigma(\hat{x})$

mit

$$\underline{f(x') = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{x'}(x)\, f(x)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \delta(x-x')\, f(x)$$

Wa-Verteilung bzgl. $\mathfrak{X}$:

"Entwicklung" der ZF $\psi_t(x) \equiv \psi(x,t)$ nach (wie oben normierten) Orts-EF $u_{x'}(x)$:

$$\psi_t(x) = \int_{\mathbb{R}} dx'\, \underbrace{\psi_t(x')}\, u_{x'}(x)$$

$$\psi_t(x') = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{x'}(x)\, \psi_t(x)$$

$$\underline{\underline{W(x',t) = |\psi_t(x')|^2 = |\psi(x',t)|^2}}$$ BORN!

"Kreis" hat sich geschlossen!

"Schimmel" "funktioniert auch für potentielle Energie $\mathcal{V}$ und kinetische Energie $\mathcal{T}$

Selbst überlegen! Beachte dabei:

1) $u_{x'}(x) = \delta(x-x')$

ist auch EF von $\hat{V} = V(\hat{x})$, und zwar zum EW $V(x')$.

2) $u_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$

ist auch EF von $\hat{T} = T(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, und zwar zum EW $\frac{p'^2}{2m}$.

Jetzt kommt die "Nagelprobe": die Fragen 3,4!

Teilchengesamtenergie $\mathcal{H}$ $\longleftrightarrow$ Hamiltonoperator $\hat{H}$:

EWP von $\hat{H}$: $\boxed{\hat{H}u = Eu \quad , u \neq 0}$

("zeitunabh. SG")

EW-Parameter hier mit E bezeichnet (statt λ)

Lösen des EWP: Dgl.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad , u(x) \not\equiv 0$$

Für $x \to \pm\infty$ reguläre (endliche) Lsgn. gesucht.

Kann man ohne Spezifizierung von $V(x)$ nicht behandeln, deshalb Spezialfall betrachtet.

Lösung des EWP von $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\hat{x}^2$

(linearer harmon. Oszillator)

LA 1 (Balcar):

$$\hat{H} u_n = E_n u_n \quad , \; n \in \mathbb{N}_0$$

$$\sigma(\hat{H}) = \{ \underbrace{E_n}_{\text{EW}} = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 \;, \; n \in \mathbb{N}_0 \}$$

$$= \{ \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0, \tfrac{3}{2}\hbar\omega_0, \tfrac{5}{2}\hbar\omega_0, \dots \}$$

$$\underbrace{u_n(x)}_{\text{EF}} = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} H_n(\alpha x) \;, \quad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

$$[\alpha] = L^{-1}$$

$$H_0(\xi) = 1 \,, \; H_1(\xi) = 2\xi \,, \; H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \,, \dots$$

Wahl von C_n wurde so getroffen, daß

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, |u_n(x)|^2 = 1 \qquad \text{(Normierung auf 1)}$$

gilt.

$\int \exists$ (typisch für diskretes EW-Spektrum)

Orthonormalität der EF:

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{n'}(x)\, u_{n''}(x) = \delta_{n'n''}$$

(Kroneckerdelta anstelle von δ-Fkt. bei kont. Spektrum)

EW-Spektrum $\sigma(\hat{H})$ = Meßwertspektrum von $\mathcal{E}$

(wie von Planck für harm. Oszillator angenommen!)

Antwort auf Frage 3 (Meßwertspektrum?) (hier für harm. Oszillator; analog allgemein)

EF $\{u_n, n \in \mathbb{N}_0\}$ bilden vollständigen Satz von Entwicklungsfunktionen für ("geeignete", s. später) Funktionen $f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

Entwicklungssatz (Hermitetheorem):

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n u_n(x)$$

---- Summe über ganzes Spektrum (Konvergenzbegriff s. später)

mit

$$f_n = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_n^*(x) f(x)$$

Entwicklungskoeffizient

Wa-Verteilung bzgl. $\mathcal{E}$ für linearen harm. Oszillator:

Entwicklung der ZF $\psi_t(x) \equiv \psi(x,t)$ nach (auf 1 normierten) Energie-EF $u_n(x)$:

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) u_n(x)$$

$$c_n(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_n^*(x) \psi_t(x)$$

$$W_n(t) = |c_n(t)|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} dx\, u_n^*(x) \psi_t(x) \right|^2$$

falls "Schimmel" stimmt...

Antwort auf Frage 4: $\psi(x,t) \longrightarrow$ Wa-Verteilung (für harm. Oszillator; analog allgemein)

Ist diese Interpretation tatsächlich möglich?

Zwei wichtige "Tests" dazu:

1)
$$1 = \int_{\mathbb{R}} dx\, \underbrace{|\psi_t(x)|^2}_{W(x,t)} = \int_{\mathbb{R}} dx\, \underbrace{\psi_t^*(x)}_{\sum_{n'=0}^{\infty} c_{n'}^*(t) u_{n'}^*(x)}\, \underbrace{\psi_t(x)}_{\sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) u_n(x)}$$

$$= \sum_{n,n'=0}^{\infty} c_{n'}^*(t)\, c_n(t) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx\, u_{n'}^*(x)\, u_n(x)}_{\delta_{nn'}}$$

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{|c_n(t)|^2}_{W_n(t)}$$

$$\psi_t = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)\, u_n$$

2)
$$\bar{E}(t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, \underbrace{\psi_t^*(x)}_{\text{s. oben}}\, \underbrace{(\hat{H}\psi_t)(x)}_{\sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)(\hat{H}u_n)(x)}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) (\underbrace{\hat{H} u_n}_{E_n u_n})(x) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n c_n(t) u_n(x)$$

$$= \sum_{n,n'=0}^{\infty} E_n\, c_{n'}^*(t)\, c_n(t) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx\, u_{n'}^*(x)\, u_n(x)}_{\delta_{nn'}}$$

$$\bar{E}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \underbrace{|c_n(t)|^2}_{W_n(t)}$$

ENDE "RATEWEG"