Bem.: • die Ersetzung $E \to \partial_t$, $\vec{p} \to \vec{\nabla}$ ist also
nicht ganz unproblematisch
→ wir werden solchen Vertauschungsrelationen wie oben
noch öfter begegnen, sie sind zentraler Bestandteil der QM.

wollen nun einige erste Folgerungen aus Schrödinger-Glg ziehen:

1.4 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

für $\varrho(\vec{r},t) \equiv |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)$

gilt $\partial_t \varrho(\vec{r},t) = \underbrace{(\partial_t \psi^*)}\psi + \psi^* \underbrace{\partial_t \psi}$ ((habe $\psi(\vec{r},t) \to \psi$ geschrieben))

$$\partial_t \psi = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi \qquad \text{nach Schrödinger-Glg}$$

$$\partial_t \psi^* = \frac{1}{-i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V^*(\vec{r})\right]\psi^* \qquad \text{nach (Schrödinger-Glg)}^*$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\{\left(\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\psi^*\right)\psi - \cancel{V^*\psi^*\psi} - \psi^*\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\psi + \cancel{V\psi^*\psi}\right\}$$

Annahme: $V(\vec{r})$ reell

$$= \frac{\hbar}{2im}\,\vec{\nabla}\cdot\left\{(\vec{\nabla}\psi^*)\psi - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right\}$$

! denn die Terme $(\vec{\nabla}\psi^*)\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi^*)\vec{\nabla}\psi$ kürzen sich !

$\Rightarrow \partial_t \varrho(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t) = 0$ Kontinuitäts-Gleichung "Conti"

mit $\varrho \in \mathbb{R}$, $\vec{j} \in \mathbb{R}^3$

wobei
$$\vec{j}(\vec{r},t) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left\{(\vec{\nabla}\psi^*)\psi - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right\} = \frac{i\hbar}{2m}\left\{(\psi^*\vec{\nabla}\psi)^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right\} = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

$\{(\mathrm{Re} + i\,\mathrm{Im})^* - (\mathrm{Re} + i\,\mathrm{Im})\} = -2i\,\mathrm{Im}$

← funktioniert also nur für $\psi \in \mathbb{C}$!

Conti → Erhaltungssatz (von Gauß)

definiere $N(t) \equiv \int_G d^3\vec{r}\; \varrho(\vec{r},t)$ Gebiet G

würden gerne $G \to \mathbb{R}^3$ wählen.

→ dies ist möglich, falls $\psi(\vec{r},t)$ quadratintegrabel ist,
also $|\psi(\vec{r},t)|^2 \to 0$ schneller als $\frac{1}{|\vec{r}|^3}$ für $|\vec{r}| \to \infty$

für die neue Größe $N(t)$ gilt also

$$\partial_t N(t) \overset{\text{Def }N}{=} \int_G d^3\vec{r}\; \partial_t \rho(\vec{r},t) \overset{\text{Conti}}{=} -\int_G d^3\vec{r}\; \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t)$$

$$\overset{\text{Gauß}}{=} -\int_{\partial G} d\vec{S}\cdot\vec{j}(\vec{r},t)$$

∂G: Oberfläche von G

$d\vec{S}$: Flächenelement: $d\vec{S} = |\vec{r}|^2\, d\Omega\; \vec{n}$

falls aber $|\psi(\vec{r},t)|^2 \to 0$ an der Oberfläche ∂G, dann verschwindet dort auch $\vec{j}$!

$\to$ für $G \to \mathbb{R}^3$ haben wir also $\partial_t N(t) = 0$

$\to$ N ist eine Erhaltungsgröße

aber <u>was</u> ist hier erhalten? <u>physikalische Interpretation</u>?

- Teilchenzahl?

  haben Freiheit, $\psi(\vec{r},t)$ zu normieren (vgl. oben, S. 8)

  für <u>ein</u> Teilchen bekommen wir dann die <u>Normierungsbedingung</u> $N(t) = N(0) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\; |\psi(\vec{r},t)|^2 = 1$

- $\rho(\vec{r},t)$ ist dann die <u>Wahrscheinlichkeitsdichte</u> dafür, das Teilchen am Punkt $\vec{r}$ zu finden.

aufgrund dieser Wahrsch.-Interpretation können wir nun physikal. Größen def.:

<u>Erwartungswerte</u> in der QM

- wo findet man ein Teilchen am wahrscheinlichsten?

$$\langle\vec{r}\rangle(t) \equiv \int d^3\vec{r}\; \vec{r}\,\rho(\vec{r},t) = \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)$$

- was ist die Varianz (= Schwankungsquadrat) bei Ortsmessungen?

$$(\Delta\vec{r})^2 \equiv \langle(\vec{r}-\langle\vec{r}\rangle)^2\rangle = \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t)\,(\vec{r}-\langle\vec{r}\rangle)^2\,\psi(\vec{r},t)$$

- was ist der Mittelwert des Impulses ?

laut Ü3(a) ist $\int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\; \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\,\tilde{\psi}(\vec{k},t)$

((wobei $\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\; \tilde{\psi}(\vec{k},t)\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ist))

→ also ist $\frac{|\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2}{(2\pi)^3}$ die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum,

$$\Rightarrow \langle \vec{p}\rangle(t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\; \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\; \hbar\vec{k}\; \tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

$$\overset{\text{Ü3(b)}}{=} \int d^3\vec{r}\;\; \psi^*(\vec{r},t)\,\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r},t)$$

- Varianz der Impulsmessung ?

$$|\Delta\vec{p}|^2 = \langle (\vec{p}-\langle\vec{p}\rangle)^2\rangle$$

$$= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\; \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\; \left(\hbar\vec{k}-\langle\vec{p}\rangle\right)^2\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

$$= \int d^3\vec{r}\;\; \psi^*(\vec{r},t)\; \left(-i\hbar\vec{\nabla}-\langle\vec{p}\rangle\right)^2 \psi(\vec{r},t)$$

Bem.:
- ψ's können linear superponiert werden (vgl. oben, S. 8)

→ für $\psi = \psi_1 + \psi_2$

ist $|\psi|^2 = \underbrace{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}_{\text{"klassisch"}\;\; \Sigma\ \text{Einzelwahrscheinlichkeit}} + \underbrace{\psi_1^*\psi_2 + \psi_2^*\psi_1}_{\text{qm. Interferenz}}$

- die Wahrsch.-Interpretation ist von Max Born (1926)

$\psi(\vec{r},t)$ beschreibt eine Wahrscheinlichkeitswelle (zeigt Interferenz + Beugung)

keine "reale" Welle (wie z.B. Schallwellen)

$|\psi|^2$ gibt Wahrscheinlichkeiten an

- "Philosophie" der QM ?
  - kann man mit einer Theorie zufrieden sein, die nur Wahrscheinlichkeiten liefert, und nichts "Genaues" ?
  - Theorie ist auf jeden Fall "kausal", denn die Schrödinger-Glg beschreibt $\psi(\vec{r},0) \to \psi(\vec{r},t)$ eindeutig.
  - bei mikroskopischen Prozessen müssen alle klassischen "Vorurteile" überprüft werden → mehr später.

1.5 zeitunabhängige Schrödinger-Glg.

Schrödinger-Glg. (s.o.) beschreibt die Zeitentwicklung der Wellenfkt

$$i\hbar\partial_t \psi(\vec r,t) = \left[-\frac{\hbar^2\vec\nabla^2}{2m} + V(\vec r)\right]\psi(\vec r,t) \equiv \hat H \psi(\vec r,t)$$

(hier ist der "Hamilton-Operator" $\hat H$ def.)

Können Raum- und Zeit-Abhängigkeit durch Fourier-Darst. ausdrücken (s.o.), für freie Teilchen (s.S.7) war es bereits bestimmt (Dispersions-Rel.). Was ändert sich für $V(\vec r) \neq 0$, wenn die T. also nicht mehr frei sind?

→ Separationsansatz für Wellenfkt. (da $\hat H \neq \hat H(t)$ ist)

$$\psi(\vec r,t) = \psi(\vec r)\cdot f(t)$$

wobei $f(t) \sim e^{-i\omega t} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ wie gehabt

und $\psi(\vec r)$ LK sein kann

$$= \underbrace{\Sigma\!\!\!\int}_{\text{diskrete Summe bzw kontinuierliches Integral (je nach E)}} dE \; \underbrace{N_E}_{\text{Normierungskonstante}} \psi_E(\vec r)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

((suchen also gleich die allgemeine Lsg))

→ Ansatz in Schröd.-Glg. einsetzen

$$\Sigma\!\!\!\int dE\, N_E\, \psi_E(\vec r)\, E\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \Sigma\!\!\!\int dE\, N_E\, \hat H \psi_E(\vec r)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

→ mit $\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{+\frac{i}{\hbar}\bar E t}$ auf beide Seiten operieren; $\int dt\, e^{\frac{i}{\hbar}(\bar E - E)t} = 2\pi\hbar\,\delta(\bar E - E)$

$$\cancel{N_{\bar E}}\, \psi_{\bar E}(\vec r)\, \bar E = \cancel{N_{\bar E}}\, \hat H \psi_{\bar E}(\vec r)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat H \psi_E(\vec r) = E\, \psi_E(\vec r)}$$

"Stationäre" bzw. zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

→ die erlaubten Energien sind also Eigenwerte von $\hat H$!

Eigenschaften der E, ψ_E

- falls $V(\vec r) \in \mathbb{R}$, sind auch alle E reell

denn: $\psi_E^* \cdot [\text{st.Sch.}] - [\text{st.Sch.}]^* \cdot \psi_E$ bilden

$$\to -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi_E^* \vec\nabla^2 \psi_E - (\vec\nabla^2 \psi_E^*)\psi_E\right\} \overset{(\text{s.Conti, S.9})}{=} \frac{\hbar}{i}\vec\nabla \vec j_E = (E - E^*)\,\psi_E^*\psi_E$$

jetzt $\int_G d^3\vec r$, $G \to \mathbb{R}^3$, $|\psi_E(\vec r)|^2 \overset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{r^{3+\varepsilon}}$: $\quad 0 = (E - E^*)\cdot \text{const} \Rightarrow \underline{E = E^*}$