- die $\psi_E(\vec r)$ bilden eine orthogonale Menge
  ((wie die ebenen Wellen: $\int d^3\vec r\; e^{i\vec k\vec r}\, e^{-i\vec k'\vec r} = (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec k-\vec k')$))

denn:
$$E'\int d^3\vec r\,\psi_E^*(\vec r)\,\psi_{E'}(\vec r) = \int d^3\vec r\,\psi_E^*\,\hat H\,\psi_{E'}$$
$$= \int d^3\vec r\,\psi_E^*\left[-\frac{\hbar^2\vec\nabla^2}{2m}+V(\vec r)\right]\psi_{E'}$$
zweimal partiell Integrieren, verschwindende Randterme
$$= \int d^3\vec r\,\psi_E^*\left[-\frac{\hbar^2\overleftarrow{\nabla}^2}{2m}+V(\vec r)\right]\psi_{E'}$$
$$= E\int d^3\vec r\,\psi_E^*\,\psi_{E'}$$

$$\Leftrightarrow\ (E'-E)\int d^3\vec r\,\psi_E^*(\vec r)\,\psi_{E'}(\vec r) = 0$$

$$\Rightarrow\ \underline{\int d^3\vec r\,\psi_E^*(\vec r)\,\psi_{E'}(\vec r) = 0} \quad \text{für } E\neq E'$$

"Skalarprodukt" für Funktionen

- die Art des "Spektrums" von $\hat H$ (d.h. d. EW diskret oder kontinuierlich) hängt von $V(\vec r)$ ab (Bsp später; oft hat Spektrum diskr. und kont. Anteile)
  - diskrete Energie-Eigenwerte $\equiv$ "gebundene Zustände"
    $\psi_E(\vec r)$ ist quadratisch integrierbar, und sogar lokalisiert: das Potential bindet ein einziges Teilchen an eine bestimmte Gegend
    Konvention: $\int d^3\vec r\,|\psi_E(\vec r)|^2 = 1 \quad \forall E$
    dann sind die N_E die "Amplituden", mit denen die jeweiligen E-Eigenzustände in $\psi(\vec r,t)$ vorkommen.
  - kontinuierliche Energie-Eigenwerte $\equiv$ "Streuzustände"
    analog zu ebenen Wellen: $\vec j$ verschwindet an der Oberfläche nicht, sondern Teilchen laufen ein/aus.

Zus.-Fass.

$\Rightarrow$ Lösungen von $\hat H\psi_E(\vec r) = E\,\psi_E(\vec r)$, $\hat H = \left[-\frac{\hbar^2\vec\nabla^2}{2m}+V(\vec r)\right]$

normiert durch
$$\int d^3\vec r\,\psi_E^*(\vec r)\,\psi_{E'}(\vec r) = \begin{cases}\delta_{E,E'} & (\text{für } E \text{ diskret})\\ \delta(E-E') & (\text{für } E \text{ kontinuierlich})\end{cases}$$

bilden eine angemessene Basis, die "Energiebasis".

Die allg. Lsg. der Schrödinger-Glg: $\psi(\vec r,t) = \sum\!\!\!\!\int dE\; N_E\,\psi_E(\vec r)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

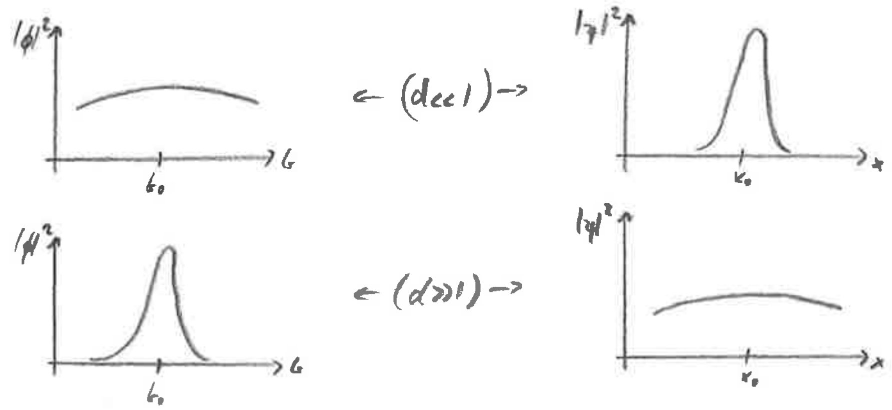
mit den Amplituden N_E ($\vec r,t$-unabhängige komplexe Konstanten)

1.6 Heisenberg'sche Unschärferelation

ein Bsp vorweg: 1D Gauß'sches Wellenpaket (s. Ü4)

$$\phi(k) \equiv N\, e^{-d^2(k-k_0)^2 - ikx_0} \qquad \left(\psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\, \phi(k)\, e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} \right)$$

$$\to |\phi(k)|^2 = |N|^2 e^{-2d^2(k-k_0)^2} \quad , \quad |\psi(x,0)|^2 = \frac{|N|^2}{4\pi d^2}\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}}$$



→ die Erwartungswerte ergeben sich bei $t=0$ zu

$$\langle x \rangle = x_0 \quad , \quad (\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = d^2$$

$$\langle p \rangle = \hbar k_0 \quad , \quad (\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4d^2}$$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

und für $t>0$ gilt dann $\Delta x \cdot \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ (s. Ü4e)

dies war ein Spezialfall der Heisenberg'schen Unschärferelation:

$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$ für beliebige Wellenfkt. und zeitgleiche Varianzen

brauchen zum allg. Beweis dieser Relation die

Schwarz'sche Ungleichung

$$\underbrace{\left| \int dx\, u^*(x)\, v(x) \right|^2}_{\equiv M} \leq \underbrace{\left(\int dx\, |u(x)|^2 \right)}_{\equiv U} \underbrace{\left(\int dx\, |v(x)|^2 \right)}_{\equiv V}$$

Beweis: def.

falls u,v lin. abhängig (also $v(x) = \lambda u(x)$) ⇒ Gleichheitszeichen gilt ✓

falls u,v lin. unabhängig ⇒ mindestens U oder $V \neq 0$. Wähle U.

zerlege $v(x) = \frac{M}{U} u(x) + \left(v(x) - \frac{M}{U} u(x) \right) \equiv \frac{M}{U} u(x) + v_\perp(x)$

es ist $v_\perp(x) \neq 0$ und $\int dx\, u^*(x)\, v_\perp(x) = M - \frac{M}{U} \cdot U = 0$

also $V = \frac{|M|^2}{U^2} U + \int dx\, v_\perp^*(x)\, v_\perp(x) > \frac{|M|^2}{U}$ qed

Beweis der Unschärferelation

für $p = -i\hbar\partial_x$ gilt $[x,p] \equiv xp - px = i\hbar$ (vgl. S. 8)

für $\bar{x} \equiv x - \langle x\rangle$ und $\bar{p} \equiv p - \langle p\rangle$ gilt

$$[\bar{x},\bar{p}] = \bar{x}\bar{p} - \bar{p}\bar{x} = [x,p] - \cancel{\langle x\rangle p} - \cancel{x\langle p\rangle} + \cancel{\langle x\rangle\langle p\rangle} + \cancel{\langle p\rangle x} + \cancel{p\langle x\rangle} - \cancel{\langle p\rangle\langle x\rangle}$$

((weil $\langle x\rangle, \langle p\rangle$ Zahlen und keine Op's sind))

$$= [x,p] = i\hbar$$

sei $\psi(x)$ eine normierte Wellenfkt. (zB $\psi_E(x)$ oder $\psi(x,t)$), $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\psi(x)$

dann

$$i\hbar = \int dx\, \psi^* i\hbar\, \psi$$

$$= \int dx\, \psi^* \bar{x}\bar{p}\,\psi - \int dx\, \psi^* (-i\hbar\partial_x - \langle p\rangle)\, \bar{x}\,\psi$$

partielle Int. im 2. Term

$$= \int dx\, \psi^* \bar{x}\bar{p}\,\psi - \int dx\, \underbrace{\psi^* (+i\hbar\overleftarrow{\partial_x} - \langle p\rangle)}_{=(\bar{p}\psi)^*}\, \underbrace{\bar{x}\,\psi}_{=(\bar{x}\psi^*)^*}$$

$$= 2i\, \mathrm{Im}\left\{ \int dx\, \psi^* \bar{x}\bar{p}\,\psi \right\}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = \left(\mathrm{Im}\{\ldots\}\right)^2 \overset{\text{immer}}{\leq} \mathrm{Re}\{\}^2 + \mathrm{Im}\{\}^2 = \left| \int dx\, \underbrace{\psi^* \bar{x}}_{=u^*}\, \underbrace{\bar{p}\,\psi}_{=v} \right|^2$$

Schwarz'sche Ungl.

$$\leq \left(\int dx\, \psi^* \bar{x}^2 \psi \right) \left(\int dx\, \psi^* (i\hbar\overleftarrow{\partial_x} - \langle p\rangle)(-i\hbar\overrightarrow{\partial_x} - \langle p\rangle)\,\psi \right)$$

hier partiell integrieren

$$= (\Delta x)^2 (\Delta p)^2$$

qed

Bem.: • Beweis geht noch allgemeiner: für zwei (hermitesche) Operatoren A, B ist $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A,B] \rangle|$, und oben haben wir den Spezialfall $A = x$, $B = p$ genommen.

minimales Wellenpaket

erfüllt die Glg $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$,

sollte also die "beste Näherung" an ein klassisches Teilchen sein.

wie könnte es aussehen ?

(a) $\int dx\, \psi^* \bar{x}\bar{p}\,\psi$ muss rein imaginär sein (s.o., bei $\overset{\text{immer}}{\leq}$)

(b) u, v müssen linear abhängig sein, (s.o., bei $\overset{\text{Schwarz}}{\leq}$, und S. 14 unten)

$u(x) = \lambda\, v(x)$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$ $\Leftrightarrow$ $\bar{x}\psi = \lambda\, \bar{p}\,\psi$

$\overset{(a)}{\Rightarrow} \int dx\, \psi^* \bar{x}\bar{x} \psi \frac{1}{\lambda} = \frac{(\Delta x)^2}{\lambda}$ muss rein imaginär sein

schreibe also $\lambda = \frac{2d^2}{i\hbar}$ mit $d \in \mathbb{R}$

$\overset{(b)}{\Rightarrow}$ mit den Abkürzungen $\langle p \rangle \equiv \hbar k_0$, $\langle x \rangle \equiv x_0$ folgt

$$(x-x_0)\psi = \frac{2d^2}{i\hbar}(-i\hbar\partial_x - \hbar k_0)\psi$$

$$\Leftrightarrow \quad \partial_x \psi = \left[-\frac{1}{2d^2}(x-x_0) + ik_0\right]\psi = \left(\partial_x\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2} + ik_0 x + C\right]\right)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = D \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2} + ik_0 x\right]$$

also $|\psi(x)|^2 = |D|^2 \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}\right]$, $\equiv$ Bsp von S. 14!

Diskussion

- ein Teilchen $\hat{=}$ ein minimales (Gauß'sches) Wellenpaket

  eine ebene Welle $\hat{=}$ ein monochromatischer Teilchenstrahl

- in 3D: 3 Unschärfe-Rel's, $\Delta x_i \cdot \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}$

- zum Begriff "Unschärfe":

  $\hat{=}$ Breiten von Wahrscheinlichkeitsverteilungen

  Teilchen selbst nicht unscharf / verschmiert,

  sondern unsere Kenntnis seines Ortes / Impulses unscharf

  $\rightarrow$ besserer (?) Begriff: "Unbestimmtheits-" Relation

  QM gibt prinzipielle Grenze für Bestimmung von Ort / Impuls.

- Konsequenz: Begriff der "Teilchenbahn" verliert Sinn

  $\rightarrow$ aber: für Größenordnungen von Unschärfen, s. Ü4 (d)

- $\Delta x\big|_{t=t_1} \cdot \Delta p\big|_{t=t_2} < \frac{\hbar}{2}$ möglich

  (weil bei t_1, t_2 verschiedene Zustände vorliegen)