3.4. Kontinuitätsgl. für $|\psi(\underline{r},t)|^2$

- $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r})\right)\psi$

$\longrightarrow$

$$\boxed{\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) + \operatorname{div} j(\underline{r},t) = 0 \\ \rho(\underline{r},t) = \psi^*\psi = |\psi(\underline{r},t)|^2 \ \text{... Wahrscheinlichkeitsdichte} \\ j(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\underline{\nabla}\psi) - \psi(\underline{\nabla}\psi^*)\right] \ \text{... Wahrscheinlichkeitsstromdichte} \end{array}} \quad (3.36)$$

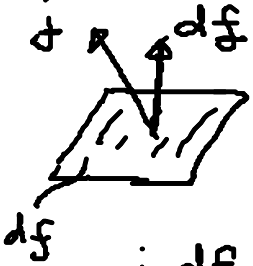
... Kontinuitätsgleichung für ρ

$\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße

- Verdeutlichung:

1. Betrachte: $\frac{d}{dt}\left[\int d^3r\, \rho(\underline{r},t)\right] = \int d^3r \frac{\partial \rho}{\partial t} \underset{(3.36)}{=} -\int d^3r \operatorname{div} j$

$$\underbrace{\qquad V \qquad}_{\text{Änderung der Wahrscheinlichkeit in V Teilchen anzutreffen}} \overset{\text{Gauß}}{=} - \underbrace{\int_{\partial V} d\underline{f} \cdot \underline{j}}_{\text{Wahrscheinlichkeit, die aus V fließt}}$$



$\underline{j} \cdot d\underline{f}$ .... Fluß von Wahrscheinlichkeit durch Fläche $d\underline{f}$

$\underline{j} \perp d\underline{f} \rightarrow$ kein Fluß

also: ρ = Erhaltungsgröße ✓

$\underline{j}$ = Stromdichte ✓

2. jetzt: $\underbrace{V}_{\text{Kugel}} \longrightarrow \infty$, Kugelkoordinaten.

$$d\underline{f} = r^2 \, d\Omega \, \underline{e}_r \qquad \text{mit } r \to \infty$$

r^2: Abstand vom Ursprung; $d\Omega$: Raum-Winkel-element $= \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$; $\underline{e}_r$: radialer Einheitsvektor

$$\int d\Omega = 4\pi$$

$$\psi \text{ ist normiert} \longrightarrow \underbrace{\psi < \frac{1}{r^{3/2}}}_{\text{fällt schneller ab, für } r\to\infty} \xrightarrow{(3.36)} j < \underbrace{\frac{1}{r^{3/2}}}_{\psi} \underbrace{\frac{1}{r^{3/2}}}_{\nabla\psi} = \frac{1}{r^4}$$

$$\boxed{\text{NR: } \int \frac{1}{r^3} r^2 d\Omega \sim \int \frac{1}{r} = \ln r \Big|_1^\infty}$$

$$\longrightarrow \int_{\partial V} d\underline{f} \cdot \underline{j} \sim \frac{1}{r^2} \xrightarrow[r\to\infty]{} 0,$$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dt}\left[\int_{V\to\infty} d^3r \, \rho(\underline{r},t)\right] = 0 \, !$$

Erhaltung der Norm $\Longrightarrow$ $\boxed{\int d^3r \rho(\underline{r},0) = 1 \xrightarrow{SG} \int d^3r \, \rho(\underline{r},t) = 1}$ (3.38)

... SG ist konsistent!

4. Die Meßgrößen in der QT = Observablen

- Mechanik: $A(\underline{r}, \underline{p}, t)$ Bsp: Energie: $A = H = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r})$

QT: $A(\ \dots\ ) \longrightarrow$ Operator

- hier: (i) Operatoren einführen
  (ii) Erwartungswerte physikal. Größen
  „Was beobachtet man im Mittel im Experiment"
  (iii) mathematische Details
- eigentlicher Meßprozeß: s. Kap. 6
  $\longrightarrow$ „Was wird gemessen im Einzelexperiment"

4.1. Skalarprodukt & Operatoren

- vgl. Vektoren $\in \underbrace{V}_{\text{Vektorraum}}$ mit $\dim V < \infty$ & Tensoren
- hier: Funktionen $\in V$ mit "$\dim V = \infty$" & Operatoren
- Funktionenraum:
  (i) $\psi(\underline{r}) \in L^2$, d.h. $\int d^3r\, |\psi(\underline{r},t)|^2 < \infty$ (4.1)
  ... „quadratintegrable Fktn."
  (ii) zusätzlich:
  ebene Wellen: $\psi_p(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ (4.2)
  auch wichtig für FT!

a) Skalarprodukt: (genauer hermitesches Skalarp.)

- **Def**: $\boxed{\varphi, \psi \in L^2: \quad \underbrace{\langle \varphi |}\underbrace{| \psi \rangle} := \int d^3r\, \varphi^*(\underline{r})\, \psi(\underline{r})}$ (4.3)
  Bra(c)-ket-Schreibweise (Dirac)

[vgl: $\underline{a} \cdot \underline{b} = a_i b_i \quad \underline{a}, \underline{b} \in V$ mit $\dim V = n$]

· Eigenschaften:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{(i)} \ \langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle \\ \text{(ii) Sesquilinearität: } a, b \in \mathbb{C} \\ \quad \langle \varphi | a\psi_1 + b\psi_2 \rangle = a \langle \varphi | \psi_1 \rangle + b \langle \varphi | \psi_2 \rangle \ \text{... linear} \\ \quad \langle a\varphi_1 + b\varphi_2 | \psi \rangle = a^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + b^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle \ \text{... semi-linear} \\ \text{(iii) positiv definite Norm:} \\ \qquad \langle \psi | \psi \rangle > 0 \quad \forall \psi \neq 0 \\ \qquad \langle \psi | \psi \rangle = 0 \rightarrow \psi = 0 \end{array}} \quad (4.4)$$

(4.3) erfüllt (4.4) $\longrightarrow$ Übungen

· Funktionen "ausmessen"!

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{orthogonale Fktn:} & \langle \psi | \varphi \rangle = 0 \\ \text{normierte} \quad \text{"} \ : & \langle \psi | \psi \rangle = 1 \end{array}} \quad (4.5)$$

· Bemerkungen:

(i) Verallgemeinerung für ebene Welle:

$$\boxed{\begin{array}{l} \langle \psi_{\underline{p}} | \psi_{\underline{p}'} \rangle \underset{(4.2)}{=} \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^3} \displaystyle\int d^3r \, e^{-\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot \underline{r}} \\ \qquad = \delta(\underline{p} - \underline{p}') \end{array}} \quad (4.6)$$

mit $\underline{r} \rightarrow \frac{\underline{r}}{\hbar}$

NB: $\psi_{\underline{p}} \perp \psi_{\underline{p}'}$ .. $\underline{p} \neq \underline{p}'$

(ii) $\langle \varphi | \psi \rangle$ auch für endl. Volumen

· Schwarzsche Ungleichung:

$$(4.4) \longrightarrow \quad \boxed{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle} \quad (4.4a)$$

Beweis: Übungen

Bem: (i) "=" für $\psi = a\varphi$

(ii) $\langle \varphi | \psi \rangle$ endlich falls $\varphi, \psi \in L^2$

b) Operatoren:

· Def.: $\boxed{\text{(beschränkter) Operator } \hat{A}, \text{ falls } \hat{A}\,\psi(\underline{r}) = \varphi(\underline{r}) \text{ mit } \psi,\varphi \in L^2}$ (4.7)

(i) ... „Abbildungen" in L^2

(ii) Anwendung auch für ebene Wellen

· im folgenden:

<u>Def.</u>: $\boxed{\text{linearen Operatoren: } \hat{A}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{A}\psi_1 + b\hat{A}\psi_2}$ (4.8)

NB.: vgl. Tensoren $\underline{\underline{T}}\,\underline{a} = \underline{b}$ Bsp: $\underline{L} = \underline{\underline{\Theta}}\,\underline{\omega}$

Bsp: $\hat{x}_i \equiv x_i$, $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$, $\frac{\partial}{\partial t}$ [Linearität klar!]

· lineare Operatoren aus linearen $\hat{A}, \hat{B}$:

$$\boxed{\begin{array}{lll} \text{(i) Multiplikation mit } a \in \mathbb{C}: & a\hat{A}, & (a\hat{A})\psi := a(\hat{A}\psi) \\ \text{(ii) Summe:} & \hat{A}+\hat{B}, & (\hat{A}+\hat{B})\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \\ \text{(iii) Produkt:} & \hat{A}\hat{B}, & (\hat{A}\hat{B})\psi := \hat{A}(\hat{B}\psi) \end{array}} \quad (4.9)$$

Beweis: $\longrightarrow$ Übungen

· spezielle lineare Operatoren: (kein ^)

$$\boxed{\begin{array}{llll} \text{(i) Einsoperator:} & 1, & 1\psi = \psi, & \hat{A}1 = 1\hat{A} = \hat{A} \\ \text{(ii) Nulloperator:} & 0, & 0\psi = 0, & 0\hat{A} = \hat{A}0 = 0 \end{array}} \quad (4.10)$$

c) <u>Kommutatoren</u> = Vertauschungsrelation (VR)

· i.a. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

$\longrightarrow$ Def.: $\boxed{\text{Kommutator von } \hat{A},\hat{B}: [\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -[\hat{B},\hat{A}]}$ (4.11)

(i) kennzeichnend für Operatoren!

(ii) $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ ... $\hat{A},\hat{B}$ kommutieren/vertauschen

(iii) vgl. Mechanik: $\{A,B\}$ ... Poisson-Klammer! Kap. 13

· Bsp.: (i) 1D: $\boxed{\hat{x} = x,\ \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \longrightarrow [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar}$ (4.12)

Beweis: $[\hat{x},\hat{p}]f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}(\hat{x}f(x))$

$$= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(x) - \frac{\hbar}{i}\underbrace{\frac{\partial}{\partial x}(x f(x))}_{f(x)+x\frac{\partial}{\partial x}f(x)} = i\hbar f(x)$$

qed

(ii) 3D: $\boxed{[\hat{x}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij},\quad [\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,\quad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0}$ (4.13)

vgl. Mechanik: $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$!!!

(iii)
$$\boxed{\begin{aligned}[f(\mathbf{r}),\hat{p}_j] &= i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_j}\\ [g(\hat{\mathbf{p}}), x_j] &= i\hbar\frac{\partial g}{\partial \hat{p}_j}\end{aligned}}$$ (4.14)

Beweis: (ii), (iii) → Übungen

· Regeln:

(i) $[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$ (4.15)

(ii) $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$ (4.16)

(iii) $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$ (4.17)

(iv) Jacobi-Identität: (4.18)

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$$

Beweis: (i)…(iii) nachrechnen

(iv) .. aufwendig

· nützliche Identitäten

(i) Baker-Hausdorff-Identität:

mit $e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{A}^n$ (4.19)

folgt $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \dots$ (4.20)

(ii) Für $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = [[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}]$ gilt:

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A},\hat{B}]} \quad (4.21)$$

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A},\hat{B}]/2} \quad (4.22)$$

Beweis: Übungen