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

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

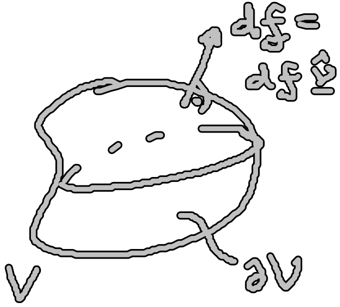
$\rightarrow$
$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) + \operatorname{div} \underline{j}(\underline{r},t) = 0 \\ &\rho(\underline{r},t) = \psi^*\psi = |\psi(\underline{r},t)|^2 \text{ ... Wahrscheinlichkeitsdichte} \\ &\underline{j}(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\underline{\nabla}\psi)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

... Kontinuitätsgleichung für ρ

$\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit = Erhaltungsgröße

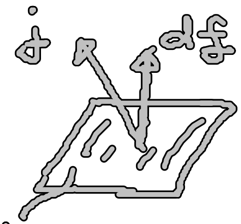
- Verdeutlichung:

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



$\underbrace{\ldots}_{\text{Änderung der Wahrscheinlichkeit im V Teilchen anzutreffen}}$

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



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

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

also: ϱ = Erhaltungsgröße ✓
$\underline{j}$ = Stromdichte ✓

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

$d\underline{f} = r^2 \, \underbrace{d\Omega}_{\substack{\text{Raum-}\\\text{Winkel-}\\\text{element}}} \, \underline{e}_r$ mit $r \to \infty$

r: Abstand vom Ursprung; $\underline{e}_r$: radialer Einheitsvektor

$d\Omega = \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$

$\int d\Omega = 4\pi$

ψ ist normiert $\longrightarrow \underbrace{\psi < \frac{1}{r^{3/2}}}_{\text{fällt schneller ab, für } r \to \infty} \xrightarrow{(3.26)} j < \underbrace{\frac{1}{r^{3/2}}}_{\psi} \underbrace{\frac{1}{r^{5/2}}}_{\nabla\psi} = \frac{1}{r^4}$

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

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

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

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

... 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: $A(\ldots) \longrightarrow$ 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.: $\boxed{\varphi, \psi \in L^2: \quad \langle\varphi|\psi\rangle := \int d^3r\, \varphi^*(\underline{r})\, \psi(\underline{r})}$ (4.3)

  Bra(c)-ket-Schreibweise (Dirac)

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

- Eigenschaften:

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

(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:

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

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

  Def: $\boxed{\text{linearen Operatoren: } \hat{A}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{A}\psi_1 + b\hat{A}\psi_2}$ (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 $\hat{A}, \hat{B}$:

  (i) Multiplikation mit $a \in \mathbb{C}$: $a\hat{A}$, $(a\hat{A})\psi := a(\hat{A}\psi)$

  (ii) Summe: $\hat{A} + \hat{B}$, $(\hat{A} + \hat{B})\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$ (4.9)

  (iii) Produkt: $\hat{A}\hat{B}$, $(\hat{A}\hat{B})\psi := \hat{A}(\hat{B}\psi)$

  Beweis: $\rightarrow$ Übungen

- spezielle lineare Operatoren: (kein ^)

  (i) Einsoperator: $\mathbb{1}$, $\mathbb{1}\psi = \psi$, $\hat{A}\mathbb{1} = \mathbb{1}\hat{A} = \hat{A}$ (4.10)

  (ii) Nulloperator: 0, $0\psi = 0$, $0\hat{A} = \hat{A}0 = 0$

c) Kommutatoren = Vertauschungsrelation (VR)

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

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

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

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) $\longrightarrow$ 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:

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0 \quad (4.18)$$

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