- Kommutator zweier Operatoren $\hat{F}, \hat{G}$

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$$

$= 0 \rightarrow$ Operatoren kommutieren

$\neq 0 \rightarrow$ Operatoren kommutieren nicht

- Resultat: Erwartungswerte <u>nicht</u> kommutierender Operatoren können <u>nicht</u> gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden.

<u>Beispiel:</u> Gauss-förmiges Wellenpakete mit Koordinate $\hat{x}$ und Impuls $\hat{p}$

Berechne Kommutatoren der Drehimpuls komponenten im 3D.

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar}$$

Dies ist klassisch nie der Fall. klassisch Messgrösse kommutiere immer. Wie kann man diese Situation mit Hilfe von Kommutatoren beschreiben?

- <u>Klassischer Grenzfall</u> der Quantenmechanik

$$\hbar \rightarrow 0$$

$$\rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] \rightarrow 0$$

$\Rightarrow$ x, p können gleichzeitig beliebig genau gemessen werden

$\Rightarrow$ de Broglie Wellenlänge $\lambda \rightarrow 0$ für $\hbar \rightarrow 0$, d.h. Interferenzerscheinungen verschwinden

- Operatoren haben in der Quantenmechanik reelle Erwartungswerte

$$\boxed{\langle \hat{F} \rangle \in \mathbb{R}}$$

für physikalisch messbare Grössen, sogenannte Observable, z. B. $\hat{x}, \hat{p}, \hat{L}, \hat{H}$

- es gilt daher für beliebige physikalische Operatoren

$$\langle F(x,p) \rangle = \langle F(x,p) \rangle^*$$

$$\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* F(x,p) \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi F^*(x,p) \psi^* \, dx$$

- Operatoren, die diese Bedingung erfüllen werden Hermite'sche oder selbstadjungierte Operatoren genannt.

- Jeder Observablen F entspricht ein Hermite'scher Operator $\hat{F}$

⇝ Übung: Konstruiere hermitesche Operatoren zur Observablen $F = x p_x - p_x x$

Gibt es Messgrössen deren zugehörige Operatoren nicht automatisch hermitisch sind?

Das zweite Postulat: Die Schrödinger-Gleichung

- Bestimmung der Erwartungswerte beliebiger Observablen ist bei Kenntnis der Wellenfunktion eines Teilchens möglich.
  - Wie bestimmt man aber die Wellenfunktion?

- Die Wellenfunktion Ψ ist Lösung einer Differential-Gleichung

$$\boxed{\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi},$$

die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung genannt wird, nach Erwin Schrödinger, der diese Gleichung 1926 postulierte.

  - für ein Teilchen im einem Potential V gilt für den Hamilton-Operator

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V}$$

Materie wellen sind Lösungen der SGL. Die SGL gilt allerdings viel allgemeiner.

• Beispiel: - Materiewelle eines Teilchens mit Gesamtenergie $E = \frac{p^2}{2m} + V$ und Impuls p

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

ist Lösung der Schrödinger-Gleichung.

- $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$ Ortsableitung der Wellenfunktion

- $\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{iE}{\hbar}\psi$ Zeitableitung der Wellenfunktion

- Gesamtenergie

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$\Rightarrow E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + V\psi$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi}$$

In der Quantenmechanik tritt die Schrödinger-Gleichung an die Stelle der Newton'schen Bewegungsgleichung zur Beschreibung der Dynamik eines Systems.

Beispiel: Teilchen mit Masse m bewege sich entlang der Koordinate x in einem Potential $V(x)$.

- Newton'sche Bewegungsgleichung

$$\boxed{\frac{d}{dt} p = F = -\frac{\partial V}{\partial x}}$$

in klassischer Mechanik

- quantenmechanisch gilt für den Erwartungswert des Impulses $\langle p \rangle$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial x} V \right\rangle}$$

⇒ berechne zeitliche Ableitung des Erwartungswertes $\langle \hat{p} \rangle$ und verwende Schrödinger-Gleichung und partielle Integration.

Stationäre Zustände und zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^* \psi \, dx$ eines Teilchens in einem stationären Zustand ist nicht von der Zeit abhängig.

  - Die Wellenfunktion eines solchen Zustands lässt sich schreiben als

Vereinfachung der Berechnung der SGL für nicht explizit von der Zeit abhängige Probleme.

$$\psi(x,t) = u(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \qquad (*)$$

$$\psi^* \psi = u^* u$$

und E: Gesamtenergie des Teilchens

$E = E_{kin} + V = \frac{p^2}{2m} + V$ für nicht-relativistische Teilchen

- Ein Teilchen ist in einem stationären Zustand, wenn seine Gesamtenergie konstant ist $\left(\frac{\partial}{\partial t} E = 0\right)$. Dies ist in einem zeitunabhängigen Potential $\left(\frac{\partial}{\partial t} V = 0\right)$ der Fall.

- Mit der Wellenfunktion $(*)$ lässt sich die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung vereinfachen.

• Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + V u = E u}$$

Welche anderen physikalischen Phänomene werden durch Gleichungen von dieser Struktur beschrieben?

Bemerkung: Diese Gleichung ist analog zu der einer Differentialgleichung, die eine stehende Welle beschreibt $\nabla^2 u + k^2 u = 0$
mit $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$.

• Eigenschaften der Lösungen ψ der Schrödinger-Gleichung

- Normierbarkeit: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^* u \, dx = 1$$

- Verhalten für $x \to \infty$:

$$\psi(x,t) = 0$$

$$u(x) = 0$$

- Stetigkeit, Eindeutigkeit, Endlichkeit:

$\psi(x)$, $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, $u(x)$, $\frac{\partial u}{\partial x}$ müssen eindeutig, stetig und endlich sein.

- Superpositionsprinzip

Eine beliebige lineare Kombination $\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$ von Lösungen Ψ_1 und Ψ_2 der Schrödinger-Gleichung ist auch eine Lösung, da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist.

• Akademische Ausnahmefälle:

- ebene harmonische Materiewellen erfüllen weder Normierbarkeit noch verschwinden sie für $x \to \infty$.
- physikalisch unrealistische Randbedingungen, wie z.B. für das Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden erfüllen die Stetigkeitsbedingungen nicht.

Beispiel auf Folien: Teilchen im Potentialtopf.