auch die WW Schrödi ist linear, d.h.

- wenn $\psi_1(\vec{r},t)$ und $\psi_2(\vec{r},t)$ Lösungen sind, so ist auch

$$\psi(\vec{r},t) = c_1 \psi_1(\vec{r},t) + c_2 \psi(\vec{r},t) \quad , \; c_1, c_2 \in \mathbb{C} \text{ konstanten}$$

- um eine Lösung eindeutig festzulegen brauchen wir Randbedingungen und eine Normierung der Lösung

1.3 Wahrscheinlichkeitsinterpretation in der QM [Münster 1.2.4, 1.3, 2.1 Fließbach I.4, I.5]

- Wir definieren die folgende Dichte $\boxed{\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t)}$,

mit folgender zeitlicher Änderung $\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t}\psi^*(\vec{r},t) + \psi(\vec{r},t)\frac{\partial \psi^*(\vec{r},t)}{\partial t}$

$\Rightarrow$ benutze die zeitabh. Schrödi, mit Annahme daß $V(\vec{r})^* = V(\vec{r})$ (und damit auch E, später):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)$$ und sein komplex konjugiertes

$$\overset{*}{\curvearrowleft} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{r},t) = \left(\quad \right)\psi^*(\vec{r},t)$$, einsetzen in Kettenregel für ρ,

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = \frac{1}{i\hbar}\left\{\left(\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V\right)\psi\right)\psi^* - \psi\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V\right)\psi^*\right\}$$ $\Rightarrow$ Terme $\sim V$ heben sich weg

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

$$= \frac{\hbar}{2im}\vec{\nabla}\left\{\left(-\vec{\nabla}\psi\right)\psi^* + \psi\vec{\nabla}\psi^*\right\} \equiv -\vec{\nabla}\vec{j}(\vec{r},t)$$ definiert einen Strom

denn die Mischterme heben sich weg

und die folgende Kontinuitätsgl. gilt

$$\boxed{0 = \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\vec{j}(\vec{r},t)}$$

wegen $\rho(\vec{r},t) \in \mathbb{R}_+$ muß $\vec{j} \in \mathbb{R}^3$ sein damit die Gl. reell ist mit $z = x+iy$, $\mathrm{Re}\, z = \frac{1}{2}(z+z^*)$ und $\mathrm{Im}\, z = \frac{1}{2i}(z-z^*)$ läßt sich $\vec{j}$ ausdrücken

$$\boxed{\vec{j}(\vec{r},t)} = \frac{\hbar}{m}\frac{1}{2i}\left[(\vec{\nabla}\psi)\psi^* - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right] = \frac{\hbar}{m}\frac{1}{2i}\left[(\vec{\nabla}\psi)\psi^* - ((\vec{\nabla}\psi)\psi^*)^*\right]$$

$$= \boxed{\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[(\vec{\nabla}\psi)\psi^*\right]}$$ (d.h. nur für $\psi \in \mathbb{C}$ erhalten wir ein $\vec{j} \neq \vec{0}$)

Beispiel: $V(\vec{r}) \equiv 0$, $\psi(\vec{r},t) = a e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$ $\Rightarrow$ $\vec{\nabla}\psi = i\vec{k}\psi$, d.h. $\vec{j} = \frac{\hbar}{m}\vec{k}|\psi|^2$

* eine Kontinuitätsgleichung impliziert immer eine Erhaltungsgröße:

Definiere die integrierte Dichte $N_G(t) = \int_G d^3\vec{r}\,\rho(\vec{r},t)$, $G \subseteq \mathbb{R}^3$

→ wir können den Limes $G \to \mathbb{R}^3$ bilden falls $|\psi(\vec{r},t)|^2$ auf $\mathbb{R}^3$ integrierbar, wegen $d^3\vec{r} = dr\,r^2 d\Omega$ muß damit das Integral über den Radialteil existiert $|\psi|$ schneller als $\frac{1}{|\vec{r}|^3} = \frac{1}{r^3}$ verschwinden (schneller als $\frac{1}{r}$ in einer Dimension)

Nun gilt $$\frac{dN_G(t)}{dt} = \int_G d^3\vec{r}\,\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} = \int_G d^3\vec{r}\,[-\vec{\nabla}\vec{j}(\vec{r},t)]$$

$$\overset{\text{Gauß'}}{\underset{\text{Satz}}{=}} -\int_{\partial G} d\vec{S}\cdot\vec{j}(\vec{r},t)$$, $d\vec{S} \perp$ zur Oberfläche ∂G von G

* wenn $|\psi|^2$ auf ∂G verschwindet im limes $G \to \mathbb{R}^3$ verschwindet i.A. auch $\vec{j}$ (s. obiges Beispiel)

$$\Rightarrow \lim_{G\to\mathbb{R}^3} \frac{dN_G(t)}{dt} = \boxed{\frac{dN(t)}{dt} = 0}$$ $$N(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\,|\psi|^2$$

d.h. $N(t)$ ist erhalten!

wenn wir folgendermaßen normieren, $$1 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = N(t) = N(0)$$ zeitunabh.

und $\psi(\vec{r},t)$ ein einzelnes qm. Teilchen, dann beschreibt $\varrho(\vec r,t)$ die <u>Wahrscheinlichkeitsdichte</u>, das Teilchen am Ort $\vec r$ zur Zeit t zu finden

$N_G(t)$ die <u>Wahrscheinlichkeit</u>, daß das Teilchen zur Zeit t in G enthalten ist

$\Rightarrow N(t) = 1$, denn irgendwo im $\mathbb{R}^3$ muß es sein.

$\Rightarrow$ Definition <u>physikalischer Größen</u> in der QM als <u>Erwartungswerte</u>:

- <u>Ort eines Teilchens</u>: wo findet man das Teilchen am wahrscheinlichsten?

<u>Erwartungswert</u> $\langle \vec r\rangle(t) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec r\, \vec r\, \varrho(\vec r,t) = \int d^3\vec r\, \psi^*(\vec r,t)\,\vec r\,\psi(\vec r,t)$ ← dies ist ein $\vec r$-unab. Vektor

(t) ← lassen wir oft weg

(für beliebige <u>Observable</u> $\langle \mathcal{O}\rangle(t) = \dfrac{\int d^3\vec r\, \psi^*(\vec r,t)\,\mathcal{O}(\vec r,t)\,\psi(\vec r,t)}{\underbrace{\int d^3\vec r\, |\psi|^2}_{=1}}$)

Betrags^2 des Vektors ≥ 0

<u>Varianz</u> $0 \leq |\Delta \vec r|^2 \equiv \langle |\vec r - \langle\vec r\rangle|^2\rangle = \langle |\vec r|^2 - 2\vec r\langle\vec r\rangle + |\langle\vec r\rangle|^2\rangle$

(nicht Laplace hier!)

$= \int d^3\vec r\, \psi^*(\vec r,t)\,|\vec r - \langle\vec r\rangle|^2\,\psi(\vec r,t) = \langle |\vec r|^2 - |\langle\vec r\rangle|^2\rangle$

$= \int d^3\vec r\, \psi^* |\vec r|^2 \psi - |\langle\vec r\rangle|^2$, $= \langle|\vec r|^2\rangle - |\langle\vec r\rangle|^2$, i.A. $\neq 0$

↑ s.o.

- <u>Impuls eines Teilchens</u>:

mit $\vec p = \hbar\vec k$ und für freies Teilchen $\psi(\vec r,t) = a e^{i(\vec k\vec r - \omega t)}$

brauchen wir den Erwartungswert bzgl. $\int d\vec k$ <u>oder</u> wir benutzen $\vec p = -i\hbar\vec\nabla$.

<u>Üa</u>: für $\psi(\vec r,t) = \int \frac{d^3\vec k}{(2\pi)^3}\, \tilde\psi(\vec k,t)\, e^{i\vec k\vec r}$

↑ 3D FT von $\psi(\vec r,t)$ bzgl. $\vec r$

gilt $\int_{\mathbb{R}} d^3\vec r\, \psi^*(\vec r,t)\,\psi(\vec r,t) = \int \frac{d^3\vec k}{(2\pi)^3}\, \tilde\psi^*(\vec k,t)\,\tilde\psi(\vec k,t)$

d.h. $\underbrace{\tilde\psi^*(\vec k,t)\,\tilde\psi(\vec k,t)}_{(2\pi)^3}$ ist <u>die Wahrscheinlichkeitsdichte</u> im $\vec k$- oder <u>Impulsraum</u>!

d.h. wir haben $\langle \vec{p}\rangle(t) = \dfrac{\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\, \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hbar\vec{k}\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)}{\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2 = 1} = \langle \hbar\vec{k}\rangle(t)$

↑ dies ist ein $\vec{k}$-unabh. Vektor

und es gilt (Ü 1) $= \int d^3\vec{r}\, \psi^*(\vec{r},t)\, (-i\hbar\vec{\nabla})\, \psi(\vec{r},t)$ ⟶ wirkt nur auf ψ!

d.h. das ist konsistent mit der Ersetzung $\vec{p} \to$
(wenn wir dies an die richtige Stelle schreiben, Formalismus später)

<u>Varianz</u> $|\Delta\vec{p}|^2 = \langle |\vec{p} - \langle\vec{p}\rangle|^2 \rangle = \langle |\vec{p}|^2 - |\langle\vec{p}\rangle|^2 \rangle$

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

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

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

zurück zur Wahrscheinlichkeitsinterpretation:

* da Schrödi linear ist können wir 2 Lsg. $\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ superponieren, d.h. $\psi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t)$ <u>ist auch Lsg.</u>

$$\Rightarrow |\psi(x,t)|^2 = \underbrace{|c_1\psi_1(x,t)|^2 + |c_2\psi_2(x,t)|^2}_{\text{klassische Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten}} + \underbrace{c_1c_2^*\psi_1(x,t)\psi_2^*(x,t) + c_1^*c_2\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t)}_{\text{qm Interferenzterme}}$$

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik wo Newton/Lagrange/Hamilton <u>eindeutig</u> die Lsg für die Bahn eines Teilchens vorgeben, erlaubt die Schrödingergleichung, die <u>Wahrscheinlichkeit zu</u> bestimmen, daß wir für ein qm. Teilchen einen gewissen Ort oder Impuls finden.

((auch in der klass. Mech. gibt es Situationen, in denen eine deterministische Beschreibung zusammenbricht, z.B. bei chaotischen Systemen. Die Gründe sind aber andere))