1.5 Heisenbergsche Unschärferelation [Münster 1.6, Fließbach I.7]

- Für beliebige Wellenfunktionen erfüllen deren zeitgleiche Varianzen:

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

d.h. zur gleichen Zeit kann das Produkt der Varianz des Ortes und der Varianz des Impulses nicht beliebig klein werden.
[Heisenberg: Unbestimmtheitsrelation]

Bsp Wasserstoffatom (H-Atom)

$\varnothing$ des H-Atom im Grundzustand $a_0 \approx 0{,}53 \cdot 10^{-10}$ m Bohrsche Radius

um $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ zu erfüllen

ergibt sich mit: $\Delta x \approx 10^{-10}$ m für das Elektron

$$\Rightarrow \Delta p \approx 10^{-24}\,\mathrm{kg\,m\,s^{-1}} \underset{\cdot (m_e \approx 10^{-30})^{-1}}{\Rightarrow} \Delta v \approx 10^{6}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$$

* Wenn das e^- gerade in den Kern fällt (bzw. durchfliegt), mit dem Kern = Protonradius $\approx 10^{-15}$ m erhöht sich Δp und damit Δv um 10^5, d.h. es fliegt auch ganz schnell wieder raus!

Beweis (in 1.8): S.g. es gilt $\boxed{i\hbar = [x, \hat{p}]}$ wegen $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ kommutiert nicht

$$\Rightarrow [(x - \langle x\rangle), (\hat{p} - \langle \hat{p}\rangle)] = (x - \langle x\rangle)(\hat{p} - \langle \hat{p}\rangle) - (\hat{p} - \langle \hat{p}\rangle)(x - \langle x\rangle)$$

$$= x\hat{p} - x\langle \hat{p}\rangle + \langle x\rangle \hat{p} + \langle x\rangle\langle \hat{p}\rangle - \hat{p}x + \hat{p}\langle x\rangle + \langle \hat{p}\rangle x - \langle \hat{p}\rangle\langle x\rangle$$

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

, denn die Erwartungswerte $\langle x\rangle$, $\langle \hat{p}\rangle$ sind Zahlen, die mit x und $\frac{d}{dx}$ vertauschen.

Sei $\psi(x)$ eine Wellenfunktion [$\psi_E(x)$ im stationären Fall, $\psi(x,t)$ im zeitabh. Fall],

d.h. $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\psi(x) = 1$

$$\Rightarrow i\hbar = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, i\hbar\, \psi(x)$$, setze Kommutator ein

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\,(x-\langle x\rangle)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)$$

vertauscher

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)(x-\langle x\rangle)\,\psi(x)$$

partielle Integration gibt "=", Randterm verschwindet

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\,(x-\langle x\rangle)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)$$

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)\,(x-\langle x\rangle)\left(+i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi^*(x)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{2} = \frac{1}{2i}\,(\text{rechte Seite}) = \mathrm{Im}\underbrace{\left\{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)(x-\langle x\rangle)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)\right\}}_{z}$$

- wegen $|z|^2 = x^2+y^2$ für $z = x+iy$, $x = \mathrm{Re}\, z$, $y = \mathrm{Im}\, z$

  gilt natürlich $|z|^2 \geq (\mathrm{Im}\, z)^2 = y^2$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \leq \left|\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\,(x-\langle x\rangle)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)\right|^2$$

* wir benutzen die Schwarzsche Ungleichung (gilt in Hilberträumen)

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u^*(x)\, v(x)\right|^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |u(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |v(x)|^2 ,$$

mit $u^*(x) = \psi^*(x)(x-\langle x\rangle)$ und $v(x) = \left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)(x-\langle x\rangle)^2\psi(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\underbrace{(+i)\hbar\frac{d}{dx}}_{\text{partielle Integration}} - \langle\hat p\rangle)\psi^*(x)\right)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)\psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)(x-\langle x\rangle)^2\psi(x) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\langle\hat p\rangle\right)^2\psi(x)$$

$$= (\Delta x)^2(\Delta p)^2, \text{ d.h. } \frac{\hbar}{2} \leq \Delta x\,\Delta p \quad ✓$$

⌈ Beweis der Schwarzschen Ungleichung:

$$0 \leq f(\lambda) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, [u^*(x) - \lambda^* v^*(x)][u(x) - \lambda v(x)] \qquad \text{für } \lambda \in \mathbb{C}$$

$u(x), v(x)$ quadrat.int. $\neq 0$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \{u^*u - \lambda u^* v - \lambda^* v^* u + |\lambda|^2 v^* v\}$$

setze $U \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u^*u$, $\underbrace{V = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, v^*v}_{\geq 0}$, $\mu = \mu_1 + i\mu_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, v^* u$ (Re-, Im-teil)

und $\lambda = \lambda_1 + i\lambda_2$

$$\Rightarrow f(\lambda) = U - \lambda\mu - (\lambda\mu)^* + |\lambda|^2 V$$

$$= U - 2\lambda_1\mu_1 - 2\lambda_2\mu_2 + (\lambda_1^2+\lambda_2^2)V$$

$$= \underbrace{\left(\lambda_1\sqrt{V} - \frac{\mu_1}{\sqrt{V}}\right)^2}_{\geq 0} + \underbrace{\left(\lambda_2\sqrt{V} - \frac{\mu_2}{\sqrt{V}}\right)^2}_{\geq 0} + U - \frac{\overbrace{\mu_1^2+\mu_2^2}^{|\mu|^2}}{V}$$

wähle λ so daß $=0$, $=0$

d.h. $f(\lambda_{min}) = U - \frac{|\mu|^2}{V} \geq 0$, d.h. $|\mu|^2 \leq UV$

d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, v^*u \int_{-\infty}^{\infty} dx\, v u^* = \left|\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u^* v\right|^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} dx |u|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |v|^2$ ⌋

Beispiel für eine Wellenfunktion $\Psi(x,t)$, die die Unschärferelation mit "=" erfüllt:

- betrachte das Gaußsche Wellenpaket aus Ü 1.1.

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \phi(k)\, e^{ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}}, \quad \text{mit } \phi(k) = A\, e^{-a^2(k-k_0)^2 - ikx_0}$$

$$\Rightarrow |\phi(k)|^2 = |A|^2 e^{-2a^2(k-k_0)^2}$$

zu $t=0$ gilt damit $|\Psi(x,0)|^2 = \dfrac{|A|^2}{4\pi a^2}\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}$

- Für die Erwartungswerte ergibt sich

zu $t=0$ (Ü 2.1): $\langle x \rangle = x_0$ Lage des Maximums im Ortsraum, um das Gauß zentriert

$\langle p \rangle = \hbar k_0$ Lage des Max. im Impulsraum, um das Gauß zentriert

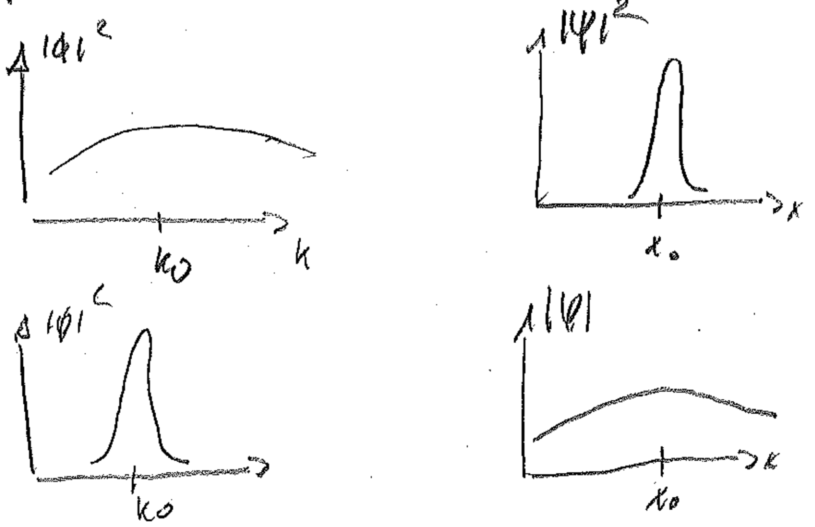
* die Varianzen geben ein Maß für die Breite der Funktionen

$$\left.\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = a^2 \\ (\Delta p)^2 &= \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4a^2} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p = a \cdot \frac{\hbar}{2a} = \frac{\hbar}{2}$$

allerdings gilt für $t>0$ daß $\Delta x \cdot \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ (Ü 2.1)

$a \ll 1$

$a \gg 1$



d.h. Breite Impulsverteilung hat schmale Verteilung im Ortsraum und umgekehrt! (diesen Zusammenhang kennen wir aus der FT)

• Eine Wellenfunktion, die $\underline{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$ erfüllt sollte einem klassischen Teilchen am nähesten sein, da die Unschärfe so klein wie möglich ist, und diese klassisch für $\hbar \to 0$ verschwindet.

* Wie kann man solche ψ mit "=" charakterisieren

– bei der Herleitung der Unschärferelation haben wir gesehen:

S. 19: $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\,(x - \langle x\rangle)\left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p}\rangle\right)\psi(x) = i\hbar$ ist rein imaginär

– beim Beweis der Schwarzschen Ungleichung haben wir gesehen:

$$0 \le f(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, [u^*(x) - \lambda^* v^*(x)][u(x) - \lambda v(x)]$$

d.h. wenn $0 = f(\lambda_{min})$ muß für λ_{min} $|u(x) - \lambda_{min} v(x)|^2 = 0$ $\forall x$ gelten, also $\boxed{u(x) = \lambda_{min}\, v(x)}$

$\Rightarrow$ mit S. 19 $\quad u(x) = \psi(x)(x - \langle x\rangle)$, $v(x) = \left(-i\hbar\frac{d}{dx} - \langle\hat{p}\rangle\right)\psi(x)$

für $\lambda_{min} \neq 0$: $\quad \stackrel{!}{=} \frac{u(x)}{\lambda_{min}} = \frac{\psi(x)(x - \langle x\rangle)}{\lambda_{min}}$

s.o.

$$0 = \mathrm{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)(x - \langle x\rangle)\left(-i\hbar\frac{d}{dx} - \langle\hat{p}\rangle\right)\psi(x)$$

$$= \mathrm{Re}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \frac{(x - \langle x\rangle)^2}{\lambda_{min}}\, \psi(x)\right\} = (\Delta x)^2\, \mathrm{Re}\left(\frac{1}{\lambda_{min}}\right)$$

d.h. λ_{min} ist rein imaginär, def. also $\lambda_{min} = \frac{2a^2}{i\hbar}$, ferner $\langle\hat{p}\rangle = \hbar k_0$, $\langle x\rangle = x_0$

$$\Rightarrow \quad v(x) = \frac{1}{\lambda_{min}} u(x) \Leftrightarrow \left(-i\hbar\frac{d}{dx} - \langle\hat{p}\rangle\right)\psi(x) = \frac{i\hbar}{2a^2}(x - \langle x\rangle)\psi(x)$$

$$\Rightarrow \quad -i\hbar\frac{d\psi}{dx} = \frac{i\hbar}{2a^2}(x - x_0)\psi + \hbar k_0 \psi(x)$$

$$\stackrel{\cdot\frac{i}{\hbar}}{\Leftrightarrow} \quad \frac{d\psi}{dx} = \left[-\frac{1}{2a^2}(x - x_0) + i k_0\right]\psi(x) = \left(\frac{d}{dx}\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + i k_0 x + \mathrm{const}\right]\right)\psi(x)$$

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

$$|\psi(x)|^2 = |D|^2 \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right]$$

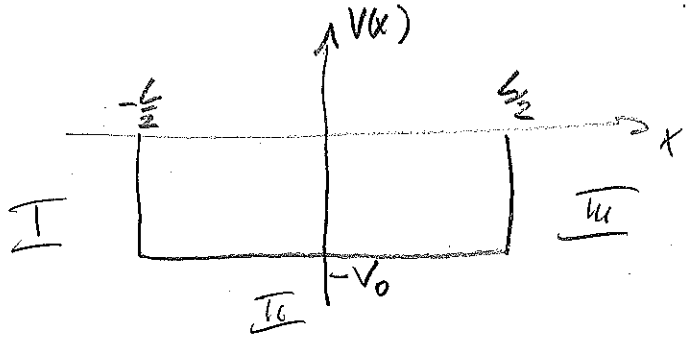
Dies ist genau das Beispiel eines gaußschen Wellenpaketes von Ü 1.1 (s. S. 21), d.h. klassische Teilchen $\approx$ minimales gaußsches Wellenpaket.

zum Vergleich: ein monochromatischer Strahl von qm Teilchen $\hat{=}$ ebene Welle

2. Eindimensionale Wellenmechanik

In diesem Kapitel betrachten wir verschiedene Beispiele für Lösungen der zeitunabhängigen Schrödi in einer Raumdimension
$\rightarrow$ starke (mathematische) Vereinfachung, enthält wichtige qm Effekte

2.1 Teilchen im Kastenpotential [Münster 3.1, 3.2.1, Fließbach II.11, III.20]



• in der klassischen Mechanik sind alle Energien $E > -V_0$ erlaubt, und für $E < 0$ kann sich ein klass. Teilchen nur zwischen $-\frac{L}{2} \leq x < \frac{L}{2}$ aufhalten. In der QM ist beides nicht der Fall, wie wir sehen werden!

zeitunabh. Schrödi in 1D: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_E(x) = E\,\psi_E(x)$

$$\text{mit } V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } |x| > \frac{L}{2} \end{cases}$$