**Ergänzungen zur Quantenphysik**

# Der Impuls in der Quantenmechanik

## oder: “von der klassischen Größe zum quantenmechanischen Operator”

Dieser Text ist eine Art Kurzfassung, aber auch Ausdehnung des Abschnittes *1.5 Impuls* im Buch *Quantenmechanik* von David J. Griffiths. Knapp zusammengefasst werden die ausführlichen Erläuterungen, breiter gezeigt werden hingegen die mathematischen Umformungen, die im Buch für ein ausgiebig vorbereitetes Publikum von Studierenden im dritten Studienjahr formuliert sind.

### Der Erwartungswert $\langle x \rangle$ des Ortes

Zu Beginn verdeutlicht Griffiths die Bedeutung des örtlichen Erwartungswert

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \tag{1}$$

eines durch die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ beschriebenen Teilchens. Kurz und knapp:

> *Der Erwartungswert $\langle x \rangle$ ist der Mittelwert von wiederholten Messungen (des Ortes) an einem Ensemble von identisch präparierten Teilchen.*

### Die zeitliche Veränderung $\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t}$ des örtlichen Erwartungswertes $\langle x \rangle$

Der örtliche Mittelwert $\langle x \rangle$ kann sich verändern, weil sich $\Psi(x,t)$ gemäß der Schrödinger-Gleichung entwickelt. Aus diesem Umstand lässt sich ein von $\Psi(x,t)$ abhängiger Ausdruck für diese Veränderung, also für $\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t}$ herleiten. Diese Herleitung ist im Buch sehr knapp gehalten. Wir wollen sie hier deshalb ein bisschen ausbreiten:

1. Zunächst folgt aus der zeitlichen Ableitung von (1) und nach der erlaubten Vertauschung von Ortsintegral und der zeitlicher Ableitung:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{-\infty}^{+\infty} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \left( x \, |\Psi(x,t)|^2 \right) \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \tag{2}$$

   Da der Ortswert $x$ unter dem Integral nicht von der Zeit $t$ abhängt, kann er vor die zeitliche Ableitung genommen werden.

2. Nun lässt sich der Ausdruck $\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2$ weiter auseinandernehmen, denn einerseits ist $\Psi(x,t)$ lediglich eine komplexe Zahl, deren Betragsquadrat sich mittels ihres komplex Konjugierten $\Psi^*(x,t)$ als Produkt schreiben lässt:

$$|\Psi(x,t)| = \Psi^*(x,t) \, \Psi(x,t) \tag{3}$$

   Andererseits wenden wir beim Ableiten einfach die Produktregel an, wobei wir nun die andauernde Nennung der Funktionsargumente $(x,t)$ zugunsten der Übersichtlichkeit weglassen wollen:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi^* \, \Psi \right) = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \, \Psi + \Psi^* \, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{4}$$

3. Nun sind aber $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ und $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ Teil der Schrödinger-Gleichung resp. ihres komplex Konjugierten:

$$\mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \, \Psi \qquad \text{und} \qquad -\mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \, \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V \, \Psi^* \tag{5}$$

Nach Division durch $\mathrm{i}\hbar$ resp. $-\mathrm{i}\hbar$ erhalten wir:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} V\,\Psi \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} V\,\Psi^* \tag{6}$$

Auf den rechten Seiten wollen wir beide Summanden noch mit $\frac{\mathrm{i}}{\mathrm{i}}$ erweitern, sodass aus $\frac{1}{\mathrm{i}}$ jeweils $\frac{1}{\mathrm{i}} \cdot \frac{\mathrm{i}}{\mathrm{i}} = \frac{\mathrm{i}}{-1} = -\mathrm{i}$ wird. Es folgt:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi^* \tag{7}$$

Diese Ausdrücke wollen wir nun in (4) einsetzen, wodurch sich dieser drastisch verändert und wobei sich das Potential $V$ wegstreicht:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi|^2 &= \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\;\Psi + \Psi^*\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} \\
&= \left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi^*\right)\Psi + \Psi^*\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi\right) \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi^*\,\Psi + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\,\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} V\,\Psi^*\,\Psi \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\,\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}
\end{aligned}$$

Wir halten als Resultat dieser Umformung fest:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi|^2 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi\right) \tag{8}$$

4. Die Umformung geht aber noch weiter! Dazu bemerken wir zweimal mittels Produktregel:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) = \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^*\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \\
\text{und}\qquad &\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\Psi\right) = \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\frac{\partial \Psi}{\partial x}
\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\Psi\right) &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\Psi\right) \\
&= \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^*\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\frac{\partial \Psi}{\partial x} \\
&= \Psi^*\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi
\end{aligned}$$

Somit können wir den Ausdruck (8) nochmals neu schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi|^2 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\,\Psi\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\Psi\right) \tag{9}$$

Und damit gehen wir zurück in die in (2) begonnene zeitliche Ableitung:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,\Psi\right)\mathrm{d}x \tag{10}$$

5. Nun steht unter dem Integral ein Produkt aus der Funktion $x$ und der Ableitung $\frac{\partial}{\partial x}$ einer anderen Funktion $\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi$. Das ist die ideale Ausgangslage für eine partielle Integration:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x = \underbrace{\left[x\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x$$

Dabei muss sich bei Einsetzung der Integrationsgrenzen $-\infty$ und $+\infty$ für den Ausdruck in den eckigen Klammern $0$ ergeben, weil die Wellenfunktion und ihre Ableitungen im Unendlichen selber gegen $0$ gehen müssen, denn sonst könnte die Wellenfunktion gar nicht normierbar sein. Mit dieser Überlegung halten wir fest:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x = -\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x \tag{11}$$

6. Was da unter dem Integral steht, kann via partieller Integration nochmals zusammengefasst werden, denn es ist:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x = \underbrace{\left[-\Psi^*\Psi\right]\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x$$

Damit wird (11) zu:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x = -2\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{12}$$

7. Dieses Resultat setzen wir in den bisherigen Ableitungsausdruck (10) ein:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x$$

Nun sind wir schließlich bis zur von Griffiths notierten Gleichung 1.31 vorgestossen:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{13}$$

Wir haben einen übersichtlichen Ausdruck für die zeitliche Veränderung $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}x}$ des örtlichen Erwartungswertes $\langle x\rangle$ erhalten.

## Die Erwartungswerte von Geschwindigkeit und Impuls

Griffiths erläutert nun, was wir unter $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}$ verstehen sollten, nämlich den *Erwartungswert für die Geschwindigkeit des Teilchens*, was er in Gleichung 1.32 festhält:

$$\langle v\rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{14}$$

Wir können nun also den Erwartungswert der Teilchengeschwindigkeit aus der Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ bestimmen und folgern direkt für den Erwartungswert des Teilchenimpulses $p$ (Griffiths 1.33):

$$\langle p\rangle = m\langle v\rangle = m\,\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{15}$$

## Orts- und Impulsoperator – und weitere Operatoren

Nun schlägt Griffiths vor die Gleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls nochmals ein bisschen umzustellen (mit $-\mathrm{i} = \frac{1}{\mathrm{i}}$):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \, \Psi \, \mathrm{d}x \tag{16}$$

$$\langle p \rangle = -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left( \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \, \mathrm{d}x \tag{17}$$

Die in diesen Ausdrücken zwischen $\Psi^*$ und $\Psi$ "eingeklemmten" Klammern $(x)$ und $(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x})$ werden als **Orts**- und als **Impulsoperator** bezeichnet.[1]

Griffiths weitere Ausführung sind praktisch Wort für Wort so bedeutsam, dass ich sie hier nicht abkürzen, sondern vielmehr originalgetreu anfügen werde:

> *Wir sprechen von dem Operator $x$, der in der Quantenmechanik den Ort "repräsentiert", und dem Operator $\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x}$ für den Impuls; um die jeweiligen Erwartungswerte zu bestimmen, müssen wir den passenden Operator zwischen $\Psi^*$ und $\Psi$ einschließen und dann integrieren.*
>
> *Das ist hübsch, aber was machen wir mit all den anderen Größen? Tatsächlich lassen sich alle klassischen Variablen mithilfe von Ort und Impuls darstellen. Beispielsweise ist die kinetische Energie*
>
> $$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$
>
> *und der Drehimpuls ist*
>
> $$\vec{L} = \vec{r} \times (m\vec{v}) = \vec{r} \times \vec{p}$$
>
> *(die letzte Größe taucht natürlich bei Ausdrücken für die eindimensionale Bewegung nicht auf). Um den Erwartungswert für eine beliebige Größe $Q(x,p)$ zu berechnen, ersetzen wir einfach jedes $p$ durch $\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x}$, fügen den resultierenden Operator zwischen $\Psi^*$ und $\Psi$ ein und integrieren (Gleichung 1.36):*
>
> $$\langle Q(x,p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, \mathrm{d}x \tag{18}$$
>
> *Für den Erwartungswert beispielsweise der kinetischen Energie ($T = \frac{p^2}{2m}$) ergibt sich damit:*
>
> $$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi \, \mathrm{d}x = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \, \mathrm{d}x$$
>
> *Gleichung (18) (resp. 1.36) gibt förmlich ein Kochrezept an, mit dem man den Erwartungswert einer beliebigen dynamischen Größe eines Teilchens im Zustand $\Psi$ berechnen kann; die Gleichungen (16) und (17) sind als Spezialfälle enthalten.*
>
> *Ich habe in diesem Abschnitt versucht, Gleichung (18) (resp. 1.36) mithilfe von Borns statistischer Interpretation plausibel erscheinen zu lassen; doch eigentlich gibt die Gleichung einen im Vergleich zur klassischen Mechanik so andersartigen und radikal neuen Zugang, dass wir uns besser erst mal durch Übung an die Gleichung gewöhnen, bevor wir sie in Kapitel 3 erneut behandeln und dann auf eine bessere theoretische Grundlage stellen. In der Zwischenzeit ist es mir recht, wenn Sie die Gleichung als Axiom ansehen.*

[1] Ein *Operator* ist die Anweisung, etwas mit der darauf folgenden Funktion zu machen. Der Ortsoperator besagt, die Funktion mit $x$ zu multiplizieren; der Impulsoperator besagt, die Funktion bezüglich $x$ zu differenzieren (und das Ergebnis mit $-\mathrm{i}\hbar$ mal zu nehmen). In der Quantenmechanik sind alle Operatoren Ableitungen (z.B. $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$, $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}$, $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$ usw.) oder Multiplikationsfaktoren (z.B. $2$, $\mathrm{i}$, $x$, $x^2$ usw.) oder Kombinationen daraus.