Übungen zum physikalischen Ergänzungsfach

Serie 11: Operatoren, Unschärferelation und Variablenseparation

- • *Basic* – Dinge, die du einfach gesehen und bearbeitet haben musst → **obligatorisch!**
- •• *Die Essenz* – zentrale Aufgabe für das grundlegende Verständnis → **obligatorisch!**
- ○ *Noch ein Beispiel* – Zusatzaufgabe mit weiterer Anwendung zur Vertiefung → **fakultativ!**
- ○○ *Du willst es? Du kriegst es!* – längere, weiterführende Aufgabe mit neuen Inhalten → **fakultativ!**

1. •• *Rund um Operatoren*

Im Buch von Griffiths haben wir den Begriff des **Operators** kennengelernt. Dieser ist stets als *Anweisung zur Modifikation einer Funktion* zu verstehen. Das bedeutet, Operatoren verändern die dahinter stehende Funktion auf eine bestimmte Art und Weise. Zur besseren Unterscheidung von normalen Variablen werden Operatoren oft mit einem Hütchen gekennzeichnet. Z.B. könnte ich die Operatoren

$$\widehat{a}f(x) := f(x) + 3 \qquad \text{und} \qquad \widehat{b}f(x) := 2 \cdot f(x)$$

definieren, die die dahinter notierte Funktion modifizieren, indem die Zahl 3 hinzuaddiert oder die ganze Funktion mit dem Faktor 2 multipliziert wird. Durch die Anwendung eines Operators wird aus einer bisherigen Funktion f also einfach eine neue Funktion $\widehat{a}f$ erzeugt.

Der Ortsoperator $\widehat{x}$ ist recht vergleichbar mit obigem Multiplikationsoperator $\widehat{b}$:

$$\widehat{x}f(x) := x \cdot f(x)$$

Anders sieht es mit dem Impulsoperator $\widehat{p}$ aus. Hierbei handelt es sich nämlich um einen sogenannten *Differentialoperator*, der die Funktion nach dem Ort ableitet:

$$\widehat{p}f(x) := \frac{h}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\,f(x) = \frac{h}{\mathrm{i}}\frac{\partial f}{\partial x}$$

(a) Im Buch von Griffiths haben wir im Abschnitt *1.5 Impuls* gelernt, dass sich jede klassische mechanische Variable aus Ort x und Impuls $p = mv$ zusammensetzen lässt. Griffiths führt dort das Beispiel der kinetischen Energie an:

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

Dem entsprechend kann zu jeder klassischen Größe ein Operator angegeben werden, der sich aus $\langle x\rangle$ und $\langle p\rangle$ zusammensetzt.
Wenn wir nun von einem Teilchen in Zustand Ψ die Varianz σ_T^2 der kinetischen Energie bestimmen möchten, so brauchen wir dafür nicht nur $\langle T\rangle$, sondern auch $\langle T^2\rangle$, weil $\sigma_T^2 = \langle T^2\rangle - \langle T\rangle^2$.

Wie sehen denn die quantenmechanischen Operatoren $\widehat{T}$ und $\widehat{T^2}$ aus?

(b) Als **Kommutator** zweier Operatoren $\widehat{A}$ und $\widehat{B}$ definieren wir den Ausdruck

$$[\widehat{A}, \widehat{B}\,] := \widehat{A}\,\widehat{B} - \widehat{B}\,\widehat{A}$$

Für die Quantenphysik ist von Interesse – weshalb, werden wir später sehen – ob die Operatoren $\widehat{A}$ und $\widehat{B}$ zu zwei Grössen A und B miteinander **vertauschen**. Damit meint man, dass ihr Kommutator verschwindet, also 0 ergibt.

Zeige, dass der Kommutator des Orts- und des Impulsoperators nicht gleich 0 ist.

Hinweis 1: Operatoren ergeben für sich alleine keinen echten Sinn. Sie müssen schon auf eine Funktion f angewendet werden. Benutze also eine beliebige Funktion $f(x,t)$, auf die du den Kommutator $[\widehat{x}, \widehat{p}]$ anwendest.

Hinweis 2: Der Kommutator $[\widehat{x}, \widehat{p}]$ ist selber wieder ein Operator. Wie lautet er?

2. •• *Der Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators*

Hier geht es um die **Aufgabe 1.9 auf Seite 41** im QM-Buch von Griffiths. Zum ersten Mal lernen wir eine wirklich bedeutsame **Wellenfunktion** Ψ kennen:

$$\Psi(x,t) = A \cdot e^{-a\left[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t\right]} = A \cdot e^{-amx^2/\hbar} \cdot e^{-\mathrm{i}at}$$

Wie wir noch sehen werden, handelt es sich hierbei um den **Grundzustand des harmonischen Oszillators**, also des "quantenmechanischen Federpendels".

Gehe die Aufgaben (a) bis (d) durch und löse danach auch noch die Aufgabe (e) unten.

Die folgenden **Tipps** sind sicher hilfreich:

- Bei (a) geht es um die *Normierung*. Mittlerweile solltest du wissen, wie sowas gemacht wird. Der Stolperstein ist allenfalls die Berechnung des Integrals. Verwende dazu, dass gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \qquad \text{mit} \quad \lambda > 0 \tag{1}$$

  Aus $|\Psi|^2\,\mathrm{d}x = \ldots = A^2 \int e^{-2amx^2/\hbar}$ schliesst du, dass $\lambda = \frac{2am}{\hbar}$ zu setzen ist.

- Zu (b): Berechne vorab die partiellen Ableitungen $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ und $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ und notiere sie in einer Form mit der Wellenfunktion Ψ als Faktor. Danach müssen diese Ableitungen in die Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\,\Psi \tag{2}$$

  eingesetzt werden, um einen Ausdruck für $V(x)$ zu gewinnen. Da die Wellenfunktion Ψ nun nur noch ein Faktor ist, kann sie komplett aus der Gleichung herausgestrichen werden und löst diese somit genau dann, wenn $V(x)$ eben ein bestimmter von x abhängiger Ausdruck ist.

- Bei den Berechnungen von $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ und $\langle p\rangle$ verwendest du zusätzlich zu (1) die folgenden Integrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,e^{-\lambda x^2}\,\mathrm{d}x = 0 \qquad \text{und} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,e^{-\lambda x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \qquad \text{mit} \quad \lambda > 0 \tag{3}$$

- Bei der Berechnung von $\langle p^2\rangle$ solltest du einerseits auf deine Ableitung $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$, sowie andererseits auf deine Vorarbeit bei der Berechnung von $\langle x^2\rangle$ zurückgreifen.
- Berechnung der Standardabweichungen: $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ resp. $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$.

(e) **Berechne den Erwartungswert und Standardabweichung der Gesamtenergie und erläutere anschließend die Bedeutung dieser Resultate.**

Die Gesamtenergie setzt sich aus kinetischer und potentieller Energie zusammen. Die klassische kinetische Energie ist $\frac{p^2}{2m}$, woraus in der Quantenmechanik mit dem Impulsoperator $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ der Operator $\frac{\widehat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ wird. Der Operator für die potenzielle Energie ist einfach der Faktor $V(x)$.

Der Operator für die Gesamtenergie, der als **Hamilton-Operator** oder im Englischen einfach als **Hamiltonian** $\widehat{H}$ bezeichnet wird, sieht demnach wie folgt aus:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Bevor du irgendein Integral berechnest, solltest du diesen Hamilton-Operator auf unsere Wellenfunktion anwenden. Das gibt fast überhaupt nichts zu tun, denn $\widehat{H}\,\Psi$ ist gerade die rechte Seite der Schrödinger-Gleichung, die gleich der linken Seite sein muss…

Zur $\langle E^2\rangle$ sei angemerkt, dass $\widehat{H}^2$ für die doppelte Anwendung des Operators $\widehat{H}$ steht. Das bedeutet:

$$\widehat{H}^2\,\Psi = \widehat{H}\big(\widehat{H}\,\Psi\big)$$

Damit wird auch die Berechnung von $\langle E^2\rangle$ sehr einfach.

3. ∘∘ *Freie Wahl des Nullniveaus: Klassische und Quantenmechanik im Vergleich*

Es geht um die **Aufgabe 1.8 auf Seite 39** im QM-Buch von Griffiths.

In der klassischen Mechanik haben wir gelernt, dass wir das **Nullniveau der potenziellen Energie frei wählen** dürfen. Gibt es dieses Prinzip auch in der Quantenmechanik? Falls ja, müsste uns die Schrödinger-Gleichung diese Möglichkeit garantieren.

Nehmen wir also an, $\Psi(x,t)$ sei die Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

zu einem bestimmten Potential $V(x)$. Was passiert nun mit $\Psi(x,t)$, wenn wir das Nullniveau der potenziellen Energie verändern, also irgendeine Konstante V_0 zu $V(x)$ hinzuaddieren?

Im Buch wird behauptet, dass die neue Wellenfunktion $\Psi_{\text{neu}}(x,t)$ dann durch

$$\Psi_{\text{neu}}(x,t) = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}\cdot\Psi(x,t)$$

gegeben ist. Der Vorfaktor $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ wird als **Phasenfaktor** bezeichnet.

(a) Zeige, dass obiges $\Psi_{\text{neu}}(x,t)$ die mit V_0 modifizierte Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi_{\text{neu}}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi_{\text{neu}}}{\partial x^2} + (V+V_0)\,\Psi_{\text{neu}}$$

erfüllt. Benutze dabei, dass $\Psi(x,t)$ der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung genügt.

(b) Untersuche, was mit dem **Erwartungswert**

$$\langle Q\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\widehat{Q}\,\Psi\,\mathrm{d}x$$

einer Größe Q passiert, wenn statt Ψ nun Ψ_{neu} zu dessen Berechnung verwendet wird.
Zur Erinnerung: Jeder Operator $\widehat{Q}$ setzt sich aus dem Ortsoperator $\widehat{x} = x$ und dem Impulsoperator $\widehat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ zusammen. Das bedeutet, $\widehat{Q}$ enthält garantiert keine Ableitung nach der Zeit t.
Gib schließlich eine gut begründete Antwort auf die Frage, ob auch in der Quantenmechanik das Nullniveau der potenziellen Energie frei gewählt werden kann.

4. •• *Zum mathematischen Verständnis separierbarer Lösungen*

Die folgenden Fragen repetieren den mathematischen Inhalt der Seiten 48f im QM-Buch von Griffiths.

(a) Was ist mathematisch mit einer **separierbaren Lösung** (= aufteilbaren Lösung) der Schrödinger-Gleichung gemeint?

(b) In der Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \tag{4}$$

stehen *partielle Ableitungen*, also $\frac{\partial}{\partial t}$ und $\frac{\partial}{\partial x}$, währenddem es in der "Zeitgleichung"

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}E}{\hbar} \varphi \tag{5}$$

und in der **zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \tag{6}$$

gewöhnliche Ableitungen $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ und $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ sind.
Warum muss das so sein? Resp.: Was für eine Art von Gleichung ist die Schrödinger-Gleichung (4) und wie nennt man im Gegensatz dazu die Gleichungen (5) und (6)?

(c) Wie kommt es, dass bei der Variablenseparation eine **Separationskonstante** – bei der Schrödinger-Gleichung jeweils mit E bezeichnet – eingeführt werden kann/muss?

(d) Im Prinzip lautet der vollständige Funktionsansatz für die Lösung der Zeitgleichung (5):

$$\varphi(t) = A \cdot e^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{7}$$

Zeige erstens, dass dieser Ansatz Gleichung (5) löst, und begründe zweitens, weshalb Griffiths in der Folge einfach $A = 1$ setzt resp. nur noch $\varphi(t) = e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ schreibt.

5. ∘∘ *Normierungserhaltung aufgrund der Schrödinger-Gleichung*

Im Buch von Griffiths haben wir im Abschnitt *1.4 Normierung* (S. 34) gelernt, dass die Schrödinger-Gleichung selber dafür sorgt, dass eine einmal normierte Lösung $\Psi(x,t)$ ihre Normierung beibehält, wenn die Zeit t voranschreitet. Griffiths sagt dazu: *"Ohne dieses entscheidende Merkmal wären die Schrödinger-Gleichung und die statistische Interpretation inkompatibel, und das gesamte Theoriegebäude würde zusammenbrechen"*. Den Beweis dieser Eigenschaft haben wir im Unterricht nur kurz überflogen, weil er mathematisch zwar interessant, aber für unser weiteres Verständnis nicht so zentral ist. Hier hast du die Möglichkeit, dich trotzdem damit auseinanderzusetzen. Dabei siehst du, wie sehr die verschiedenen mathematischen Werkzeuge – Differentialrechnung, komplexe Zahlen und Integrationstechniken – nun allesamt gebraucht werden. Die Aufgabe leitet dich Schritt für Schritt durch den Beweis.

(a) **Vorgabe:** Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ sei eine zu irgendeinem Zeitpunkt (z.B. bei $t=0$) normierte Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi \quad . \tag{8}$$

Wir wollen beweisen: Steuert die Schrödinger-Gleichung (8) die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion $\Psi(x,t)$, so bleibt deren Normierung erhalten.
Vorgehensweise und Ziel: Die Normierungsbedingung für Wellenfunktionen lautet:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \quad . \tag{9}$$

Was sollte demnach für die zeitliche Ableitung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x\right) \tag{10}$$

gelten, wenn die Normierung erhalten bleibt?

(b) **Vertauschung von zeitlicher Ableitung und örtlichem Integral:** Zu Beginn des Beweises wird die Ableitung nach der Zeit, die eigentlich vor dem Integralzeichen steht, einfach ins Integral hineingenommen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x\right) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x \tag{11}$$

Wir wollen an einem willkürlichen Beispiel ($f(x,t) = A\cdot\frac{t^2}{x^2}$) nachvollziehen, dass eine derartige Vertauschung des örtlichen Integrals ($\int\ldots\mathrm{d}x$) und der zeitlichen Ableitung ($\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$) in aller Regel problemlos funktioniert. Zeige dazu, dass die folgenden beiden Ausdrücke identisch sind, indem du sie in der vorgegebenen Reihenfolge integrierst und ableitest:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{1}^{+\infty} A\cdot\frac{t^2}{x^2}\,\mathrm{d}x\right) \qquad \text{und} \qquad \int_{1}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left(A\cdot\frac{t^2}{x^2}\right)\mathrm{d}x$$

Beachte bei deiner Ausführung, wie sich im ersten Fall links nach der Integration ein Ausdruck $F(t)$ ergibt, der nicht mehr von x abhängt – schliesslich hast du über $f(x,t)\,\mathrm{d}x$ integriert. Folglich steht dort vornedran nun die sogenannt *totale* Ableitung $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$. Anders beim zweiten Fall rechts: Dort wird die Funktion $f(x,t)$ zuerst nach der Zeit t abgeleitet. Dabei handelt es sich zwangsläufig um eine *partielle Ableitung* $\frac{\partial}{\partial t}$.

(c) **Ausführung der Produktregel:** $|\,\Psi(x,t)|^2$ ist das Betragsquadrat der komplexen Zahl $\Psi(x,t)$. Dabei gilt für $z\in\mathbb{C}$ stets: $|z|^2 = z^* z$, wobei z^* für das Konjugiert-Komplexe von z steht. Folglich gilt es nun also zu zeigen, dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\!\cdot\Psi\right)\mathrm{d}x = 0 \tag{12}$$

ist. (Zugunsten der Übersichtlichkeit lasse ich nun bei Ψ und Ψ^* die explizite Variablendeklaration (x,t) weg.) Das Produkt $\Psi^*\!\cdot\Psi$ muss nach der Zeit t abgeleitet werden. Führe diese Ableitung unter Verwendung der Produktregel aus.

(d) **Gleichungen komplex konjugieren:** Die Schrödinger-Gleichung (8) erlaubt uns, die zeitliche Ableitung $\frac{\partial \varPsi}{\partial t}$ durch einen Ausdruck mit der örtlichen Ableitung $\frac{\partial \varPsi}{\partial x}$ zu ersetzen, was uns die Möglichkeit geben wird, das Integral tatsächlich zu berechnen. Allerdings müssen wir nicht nur $\frac{\partial \varPsi}{\partial t}$, sondern auch $\frac{\partial \varPsi^*}{\partial t}$ ersetzen.

Jede komplexe Gleichung kann sehr leicht konjugiert werden: **Man versieht alle i's mit einem Minuszeichen und notiert anstelle der in der Gleichung enthaltenen komplexen Zahlen z jeweils das Konjugiert-Komplexe z^*.**

Wir wollen uns die Richtigkeit dieses Vorgehens plausibel machen. Für vier komplexe Zahlen z_1, z_2, z_3 und z_4 gelte beispielsweise:

$$z_1 = z_2 + \mathrm{i}z_3 - \mathrm{i}z_4 \quad .$$

Zeige, dass dann auch gilt:

$$z_1^* = z_2^* - \mathrm{i}z_3^* + \mathrm{i}z_4^* \quad .$$

Tipp: Notiere zuerst alle drei komplexen Zahlen in der Summenschreibweise $z = x + y\mathrm{i}$.

(e) **Konjugierte Schrödinger-Gleichung:** Verwende das Vorgehen aus (d), um die Schrödinger- Gleichung (8) zu konjugieren.

(f) **Einsetzen der Schrödinger-Gleichungen:** Verwende nun die Schrödinger-Gleichung und ihr Konjugiertes, um die zeitlichen Ableitungen $\frac{\partial \varPsi}{\partial t}$ und $\frac{\partial \varPsi^*}{\partial t}$ in

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varPsi^*}{\partial t}\, \varPsi + \varPsi^* \frac{\partial \varPsi}{\partial t} \right) \mathrm{d}x \tag{13}$$

durch Ausdrücke mit örtlichen Ableitungen zu ersetzen. Vereinfache das Resultat soweit, dass

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\varPsi^* \frac{\partial^2 \varPsi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varPsi^*}{\partial x^2}\, \varPsi \right) \mathrm{d}x \tag{14}$$

dasteht. Was hat sich bei dieser Vereinfachung weggestrichen?

(g) **Noch mehr Produktregel:** Überzeuge dich durch Ausführung der Ableitung $\frac{\partial}{\partial x}$ davon, dass die Klammer unter dem Integral in (14) durch den Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varPsi^* \frac{\partial \varPsi}{\partial x} - \frac{\partial \varPsi^*}{\partial x}\, \varPsi \right)$$

ersetzt werden kann. Beachte dabei zweimal die Produktregel.

(h) Bis anhin haben wir gefunden:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\varPsi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x \right) = \ldots = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varPsi^* \frac{\partial \varPsi}{\partial x} - \frac{\partial \varPsi^*}{\partial x}\, \varPsi \right) \mathrm{d}x \tag{15}$$

Schau dir das Integral rechts genau an. Weshalb lässt sich die Stammfunktion dazu ohne zusätzliche Rechnung sofort angeben?

(i) Insgesamt haben wir bis hierhin gefunden, dass

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\varPsi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x \right) = \ldots = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \cdot \left(\varPsi^* \frac{\partial \varPsi}{\partial x} - \frac{\partial \varPsi^*}{\partial x}\, \varPsi \right) \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \quad . \tag{16}$$

Nun müssen vernünftige, also *quadratintegrable* Wellenfunktionen allerdings die Eigenschaft aufweisen, dass

$$\lim_{x \to \pm\infty} \varPsi(x,t) = 0 \quad ,$$

weil sie sonst gar nicht normiert werden könnten. Was folgt daraus für unseren Ausdruck in (16) und weshalb schon wieder ist damit unser Beweis abgeschlossen?

6. ∘∘ *Die Herleitung des Impulsoperators*

In der Quantenmechanik lässt sich der Erwartungswert $\langle Q \rangle$ einer beliebigen Grösse Q via

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \widehat{Q}\, \Psi \, \mathrm{d}x \tag{17}$$

berechnen. Dabei ist $\widehat{Q}$ der zur Grösse Q gehörende *Operator*.

Besonders interessant sind der *Ortsoperator* $\widehat{x} = x$ und der Impulsoperator $\widehat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x}$, weil sich aus diesen beiden Operatoren alle weiteren Operatoren von Interesse zusammensetzen lassen.

Im Abschnitt *1.5 Impuls* im QM-Buch von Griffiths (S. 37f) wird plausibel erläutert, wie man zu diesem Impulsoperator $\widehat{p}$ gelangt. Diese rechnerische Überlegung soll hier im Detail nachvollzogen werden, weil die Mathematik in diesem Gedankengang im Buch nur grob skizziert wird, für uns aber eine gute Lerngelegenheit darstellt.

(a) Griffiths beginnt bei der zeitlichen Ableitung $\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t}$ des örtlichen Erwartungswerts $\langle x \rangle$, die im Folgenden als Erwartungswert $\langle v \rangle$ für die Geschwindigkeit verstanden wird. Dafür notieren wir zunächst:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \right) \tag{18}$$

Mache nun zuerst zwei Schritte:

i. Nimm die Ableitung nach der Zeit ins Integral hinein (vgl. Aufgabe 5.(b)).

ii. Danach kannst du den Faktor x unter dem Integral vor die zeitliche Ableitung nehmen, weil ...

(b) Nun erfolgt dieselbe Vereinfachung, die wir in den Schritten (c) bis (f) der Aufgabe 5 genau nachvollzogen haben. Zusammengefasst wird dort gezeigt, dass aus der Schrödinger-Gleichung folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \tag{19}$$

Dieses Resultat setzen wir nun einfach ein und erhalten das Zwischenresultat

$$\langle v \rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \ldots = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \mathrm{d}x \tag{20}$$

Dieses Integral lässt sich aufgrund des Vorfaktors x im Integral nun nicht so direkt berechnen wie jenes im Schritt (h) in Aufgabe 5. Allerdings können wir auch hier durchaus ausnützen, dass wir unter dem Integral bereits eine Ableitung nach dem Ort stehen haben. Das Integral in (20) hat die Form

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot g'(x) \, \mathrm{d}x \qquad \text{mit} \quad f(x) = x \quad \text{und} \quad g'(x) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \tag{21}$$

Das ist die perfekte Ausgangslage für eine *partielle Integration*, die uns ermöglichen wird, den Faktor x loszuwerden.

Repetition zur partiellen Integration: Wir betrachten die *Produktregel* beim Ableiten

$$\big[f(x)\, g(x)\big]' = f'(x)\, g(x) + f(x)\, g'(x)$$

Integrieren wir über beide Seiten, so ergibt sich:

$$\int_a^b \big[f(x)\, g(x)\big]' \, \mathrm{d}x = \int_a^b f'(x)\, g(x) \, \mathrm{d}x + \int_a^b f(x)\, g'(x) \, \mathrm{d}x$$

Nun steht auf der linken Seite aber das Integral über der Ableitung von $f(x)\,g(x)$. Eine Stammfunktion dazu ist $f(x)\,g(x)$ selber, woraus folgt:

$$\big[f(x)\,g(x)\big]\Big|_a^b = \int_a^b f'(x)\,g(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b f(x)\,g'(x)\,\mathrm{d}x$$

Durch Umstellen finden wir:

$$\int_a^b f(x)\,g'(x)\,\mathrm{d}x = \big[f(x)\,g(x)\big]\Big|_a^b - \int_a^b f'(x)\,g(x)\,\mathrm{d}x \tag{22}$$

Diese Beziehung bezeichnet man als **partielle Integration**, weil von der Funktion $h(x) = f(x)\,g'(x)$ quasi nur der "Part" resp. Anteil $g'(x)$ integriert, also aufgeleitet wird. Damit ist die Integration von $h(x) = f(x)\,g'(x)$ noch nicht abgeschlossen, vielmehr hat man das Problem auf die Berechnung des Integrals über $i(x) = f'(x)\,g(x)$ verlagert. Dieses ist aber unter Umständen wesentlich leichter zu berechnen, sodass sich die partielle Integration ausbezahlt.

Verwende nun die partielle Integration, um das Zwischenresultat in 20 neu zu schreiben.

(c) Bei der partiellen Integration entsteht ein Glied der Form

$$\left[x\cdot\left(\mathit{\Psi}^*\frac{\partial\mathit{\Psi}}{\partial x} - \frac{\partial\mathit{\Psi}^*}{\partial x}\mathit{\Psi}\right)\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \tag{23}$$

Aufgrund der Quadratintegrabilität von $\mathit{\Psi}$ entsteht beim Einsetzen der Grenzen $-\infty$ und $+\infty$ jeweils der Wert 0, denn bei einer normierbaren Wellenfunktion $\mathit{\Psi}$ muss der Funktionswert für $x\to\pm\infty$ schneller stärker als $\frac{1}{x}$ gegen 0 gehen. Dieses Glied verschwindet also komplett.

Vereinfache mit dieser Information deinen bisher für $\langle v\rangle$ gefundenen Ausdruck.

(d) Ich bearbeite das bisherige Resultat weiter, indem ich das Integral – aufgrund der für Integrale gültigen Summenregel – auf zwei Integrale verteile:

$$\begin{aligned}\langle v\rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \ldots &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\mathit{\Psi}^*\frac{\partial\mathit{\Psi}}{\partial x} - \frac{\partial\mathit{\Psi}^*}{\partial x}\mathit{\Psi}\right)\mathrm{d}x\\ &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\mathit{\Psi}^*\frac{\partial\mathit{\Psi}}{\partial x}\,\mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\mathit{\Psi}^*}{\partial x}\mathit{\Psi}\,\mathrm{d}x\right)\end{aligned} \tag{24}$$

Betrachte nur das hintere der beiden Integrale und führe damit nochmals eine partielle Integration durch (bei der ein Glied aus bereits bekanntem Grund wieder gleich 0 ist). Dadurch müsstest du schliesslich herausfinden, dass gilt:

$$\langle v\rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \ldots = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\mathit{\Psi}^*\frac{\partial\mathit{\Psi}}{\partial x}\,\mathrm{d}x \tag{25}$$

(e) Für den Erwartungswert des Impulses schreiben wir nun:

$$\langle p\rangle = m\langle v\rangle = \ldots \overset{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty}\mathit{\Psi}^*\,\widehat{p}\,\mathit{\Psi}\,\mathrm{d}x \tag{26}$$

Schliesse daraus mit dem Zwischenresultat (25) auf den Impulsoperator $\widehat{p}$.

Tipp: Nimm alle Vorfaktoren wieder ins Integral hinein und verwende $\frac{1}{\mathrm{i}} = -\mathrm{i}$.