## 1.4 Kontinuitätsgleichung

Ist die Wahrscheinlichkeitsinterpretation für alle Zeiten stabil?

Betrachte hierzu

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi}$$

Mit der Schrödinger-Gleichung erhält man

$$\dot{\psi} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi$$

$$\dot{\psi}^* = \frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V^*\right)\psi^*$$

Mit $V^* = V$ folgt

$$\dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi} = \left\{\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\cancel{+V}\right)\psi^*\right\}\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\cancel{+V}\right)\psi$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\left\{(\Delta\psi^*)\psi - \psi^*(\Delta\psi)\right\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\vec{\nabla}\cdot\left[(\vec{\nabla}\psi^*)\psi\right] \cancel{- (\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi)}\right.$$

$$\left. - \vec{\nabla}\cdot\left[\psi^*(\vec{\nabla}\psi)\right] \cancel{+ (\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi)}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla} \cdot \{ \psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi \}$$

Dies ist von der Form

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

mit

$$\rho(\vec{x},t) = (\psi^*(\vec{x},t)\, \psi(\vec{x},t))$$

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi} ( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* )$$

Kontinuitätsgleichung

Stromdichte $\vec{j}(\vec{x},t)$ : Strömung der Wahrscheinlichkeit

$$\int d^3x \; \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x},t) = \oiint^{\Sigma} d\vec{\Sigma} \cdot \vec{j}(\vec{x},t)$$

$\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen durch die (geschlossene) Oberfläche $\Sigma$ tritt.

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \; \rho(\vec{x},t) = \int d^3x \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x},t) = - \int d^3x \; \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x},t)$$

$$= \oiint^{\Sigma} d\vec{\Sigma} \cdot \vec{j}(\vec{x},t)$$

Falls $\psi(\vec{x},t)$ für $|\vec{x}| \to \infty$ hinreichend schnell verschwindet, so ist das Flächenintegral gleich Null

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \int d^3x \; \rho(\vec{x},t) = 0$$

↪ Wahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo im Raum zu finden, ist zeitlich konstant.

↪ Teilchen kann weder erzeugt noch zerstört werden [Bem.: gilt nicht mehr in der relativistischen Quantentheorie].

↪ Falls Wellenfunktion zu einem best. Zeitpunkt normiert ist, so ist sie für alle Zeiten normiert.

Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsdichte und der Teilchenzahl ist Folge davon, dass die Schrödinger-Gl. eine Zeitableitung 1. Ordnung hat. Gilt nicht mehr für die relativistische Theorie ($\rightarrow$ Klein-Gordon-Gleichung).

# 1.5 Erwartungswerte; Orts- und Impulsraum

**Klassische Physik:** Vielteilchensysteme werden durch statistische Eigenschaften beschrieben

**Beispiel:** Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung von Gasmolekülen

$$w(p) = \frac{4\pi}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} e^{-\beta p^2/2m} p^2 \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$k_B$: Boltzmann-Konstante

$w(p)$ : Wahrscheinlichkeit(sdichte) dafür, dass die Messung der Teilchengeschwindigkeit den Wert $p$ ergibt, $p = |\vec{p}|$

$w(p)$ ist normiert:

$$\int_0^\infty w(p)\, dp = 1$$

Die mittlere kinetische Energie berechnet sich zu

$$\langle T_{kin} \rangle = \int_0^\infty \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{T_{kin}} w(p)\, dp$$

$$= \ldots = \frac{3}{2} k_B T$$

Misst man die kinetische Energie so erhält man um den Mittelwert gestreute Messwerte.

Ein Maß für die Streuung ist die mittlere quadratische Abweichung (Varianz)

$$\left\langle \left( T_{kin} - \langle T_{kin} \rangle \right)^2 \right\rangle =: \left( \Delta T_{kin} \right)^2$$

Um wieviel weicht eine individuelle Messung von $T_{kin}$ vom Mittelwert ab?

$$(\Delta T_{kin})^2 = \left\langle T_{kin}^2 - 2 T_{kin} \langle T_{kin} \rangle + \langle T_{kin} \rangle^2 \right\rangle$$

$$= \langle T_{kin}^2 \rangle - 2 \langle T_{kin} \rangle \langle T_{kin} \rangle + \langle T_{kin} \rangle^2$$

$$= \langle T_{kin}^2 \rangle - \langle T_{kin} \rangle^2$$

Im Falle der Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung findet man

$$\langle T_{kin}^2 \rangle = \int_0^\infty \left( \frac{p^2}{2m} \right)^2 w(p)\, dp = \ldots = \frac{15}{4} (k_B T)^2$$

und somit

$$\Delta T_{kin} = \left\{ \frac{15}{4} (k_B T)^2 - \left( \frac{3}{2} k_B T \right)^2 \right\}^{1/2} = \sqrt{\frac{3}{2}}\, k_B T$$

# Quantenmechanik

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi|^2$, mit $\int d^3x\, |\psi|^2 = 1$, ist die Wahrscheinlichkeit dafür, ein einzelnes Teilchen in einem durch $\psi$ charakterisierten Zustand zu finden.

Allgemeiner: Sei $F = F(\vec{x})$ eine physikalische Observable, die (zunächst) nur vom Ort abhängt.

In Analogie zum klassischen Vielteilchensystem definiert man den Mittelwert

$$\langle F \rangle_t = \int d^3x\; F(\vec{x})\, |\psi(\vec{x},t)|^2$$

$$\equiv \int d^3x\; \psi^*(\vec{x},t)\, F(\vec{x})\, \psi(\vec{x},t)$$

$\langle F \rangle_t$ heißt **Erwartungswert.**

Bei wiederholter Messung unter identischen Bedingungen erhält man gestreute Messwerte, deren Mittelwert nach unendlich vielen Messungen gegen den Erwartungswert konvergiert.

Nun hänge die Observable F auch vom Impuls ab:

$$F(\vec{x}, \vec{p}) \longrightarrow F\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)$$

Sei F z.B. die x-Komponente des Impulses:

$$\langle p_x \rangle_t = \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{x},t)$$

$$\neq \int d^3x \; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^*(\vec{x},t) \, \psi(\vec{x},t) \right)$$

(Dass die erste Zeile die korrekte Definition ist, sehen wir später)

Man definiert allgemein den **Erwartungswert** einer Observablen $F = F(\vec{x}, \vec{p})$ als

$$\boxed{\langle F \rangle_t := \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \, F\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) \psi(\vec{x},t)}$$

Damit dies die Messung einer physikalischen Größe beschreibt, muss gelten

$$\langle F \rangle_t^* = \langle F \rangle_t$$

$$\Rightarrow \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \, F\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) \psi(\vec{x},t)$$

$$= \int d^3x \left[ F\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) \psi(\vec{x},t) \right]^* \psi(\vec{x},t)$$

Ein Operator $F(\vec{x}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla})$ mit dieser Eigenschaft heißt **selbstadjungiert**.

Beispiel: Impulsoperator

$$\int d^3x\, \psi^* \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi \underset{\text{P.I.}}{=} \frac{\hbar}{i}\psi^*\psi\Big|_{|\vec{x}|\to\infty} - \frac{\hbar}{i}\int d^3x\, (\vec{\nabla}\psi^*)\psi$$

$$= \int d^3x \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi\right)^*\psi \qquad \checkmark$$

**Physikalische Observable werden in der Quantenmechanik durch lineare, selbstadjungierte Operatoren beschrieben.**

## Orts- und Impulsdarstellung

Betrachte das Wellenpaket

$$\psi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \hat{\varphi}(k)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \underbrace{\hat{\varphi}(k)\, e^{-i\omega t}}_{\tilde{\varphi}(k,t)}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

Für ein freies Teilchen gilt außerdem

$$\psi(\vec{x},t) = e^{-(i/\hbar)Et}\,\psi(\vec{x}) = e^{-i\omega(k)t}\,\psi(\vec{x})$$