Wh: Matrixelement eines Operators

$$\langle \psi_1 | \underset{\curvearrowright}{\hat{A}} | \psi_2 \rangle$$

$$\langle \psi_1 | \phi \rangle \quad \text{mit } |\phi\rangle = \hat{A}|\psi_2\rangle$$

Skalarprodukt

speziell: Erwartungswert $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

(dabei $\underset{=1}{\langle \psi | \psi \rangle}$)

hermitesche Operatoren ($\hat{A}^{+} = \hat{A}$)

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$= \langle \psi_2 | \hat{A} \psi_1 \rangle^{*}$$ (während allgemein: $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^{+} \psi_1 | \psi_2 \rangle$)

$\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ reell!

Quantenmechanische Observablen (Messgrößen) werden durch hermitesche Operatoren dargestellt!

III.4. Eigenwertproblem von Operatoren, speziell von hermiteschen Operatoren

gegeben: Operator $\hat{A}$

Der Zustand $|a\rangle$ heißt Eigenzustand („Eigenket") (EZ) von $\hat{A}$, falls gilt:

$$\circledast \quad \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$ mit $a \in \mathbb{C}$ „Eigenwert" (EW)

Beispiele:

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ zeitunabhängige SG

$$\left.\begin{array}{l}\hat{\underline{p}}\,|\underline{p}\rangle = \underline{p}\,|\underline{p}\rangle \\ \hat{\underline{r}}\,|\underline{r}\rangle = \underline{r}\,|\underline{r}\rangle\end{array}\right\}\text{ vektorielle}$$

Folgerung aus ⊕ : Matrixelement (Erwartungswert) $\langle a|\underbrace{\hat{A}|a\rangle}_{|a|a\rangle} = \overset{}{a}\underbrace{\langle a|a\rangle}_{\text{reell}}$

reell oder komplex

Spezialfall: $\hat{A}$ ist hermitesch

$$\Rightarrow \underbrace{\langle a|\hat{A}|a\rangle}_{a\underbrace{\langle a|a\rangle}_{\text{reell}}} = \langle \hat{A}a|a\rangle \underset{\uparrow\text{Regel f. Skalarprodukt}}{=} \langle a|\hat{A}a\rangle^* = \Big(a\underbrace{\langle a|a\rangle}_{\text{reell}}\Big)^*$$

$\Rightarrow a = a^*$ $\Rightarrow$ Der Eigenwert ist reell!

Theorem 1: Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell!

Theorem 2: Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal!

Zeige das anhand eines Operators mit „diskretem Spektrum"

$$\begin{aligned}\hat{f}|n\rangle &= f_n|n\rangle \\ \hat{f}|m\rangle &= f_m|m\rangle\end{aligned}$$

mit $|n\rangle, |m\rangle$ Eigenzustände

$f_n \neq f_m$

es gilt: $$\langle m|\hat{f}|n\rangle \overset{\text{Eigenwertgleichung}}{\downarrow}= f_n \langle m|n\rangle \quad ①$$

$\hat{f}$ hermitesch

andererseits: $$\langle m|\hat{f}|n\rangle \overset{\downarrow}{=} \langle \hat{f}m|n\rangle = \langle n|\hat{f}m\rangle^* = (f_m \langle n|m\rangle)^*$$
$$= f_m^* \langle n|m\rangle^*$$
$$= f_m \quad \langle m|n\rangle$$

Theorem 1 ↗ ②

$$① - ② \Longrightarrow 0 = \underbrace{(f_n - f_m)}_{\neq 0} \langle m|n\rangle \Longrightarrow \langle m|n\rangle = 0$$
$\Rightarrow |m\rangle, |n\rangle$ sind orthogonal!

Beachte:

- Es ist immer günstig, normierte Eigenzustände zu verwenden, d.h. $\langle m|n\rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m=n \\ 0, & m\neq n \end{cases}$
- Umgang mit entarteten Eigenwerten

$$\hat{f}|n, \alpha_i\rangle = f_n |n, \alpha_i\rangle, \quad i = 1, \ldots, m$$

↑ ↑ „Quantenzahlen"

↑ Grad der Entartung

d.h. es gibt mehrere Eigenzustände zum selben Eigenwert!

$\Longrightarrow$ Wasserstoffatom

Energien $E_n \sim -\frac{1}{n^2}$ n „Hauptquantenzahl" daneben gibt es noch

(Bahn-) Drehimpuls-Quantenzahl l

Quantenzahl zur z-Komponente des Drehimpulses m

Spin s

Auch hier ist es immer möglich, im jeweiligen „Unterraum" (zu festem n) orthogonale EZ zu finden

$$\langle n, \alpha_i | m, \alpha_k \rangle = \delta_{nm} \delta_{ik}$$

Theorem 3:

Zwei hermitesche Operatoren $\hat{F}$ und $\hat{G}$ vertauschen genau dann, wenn sie ein gemeinsames System aus Eigenzuständen haben!

$$\begin{aligned} \hat{F}|n\rangle &= f_n |n\rangle \\ \hat{G}|n\rangle &= g_n |n\rangle \end{aligned} \quad \Longleftrightarrow \quad [\hat{F}, \hat{G}] = 0 \quad !$$

Die $|n\rangle$ sind EZ beider Operatoren; die zugehörigen Eigenwerte f_n, g_n sind i.A. verschieden

Beweis → Übung

Dieses Theorem gilt auch, wenn die Eigenwerte entartet sind!

III. 5. Nichtvertauschbarkeit und Unschärfe

Vorbemerkung

quantenmechan. System im Zustand $|\psi\rangle$ ← normiert

Erwartungswert: $\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$

Streuung:
$$\Delta\hat{F}^2 = \langle\hat{F}^2\rangle - \langle\hat{F}\rangle^2$$
$$= \langle\psi|\hat{F}^2|\psi\rangle - \left(\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle\right)^2$$
$$\left(= \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle\right)$$

quantenmechanische Unschärfe: $\Delta F = \sqrt{\Delta\hat{F}^2}$

beachte: Term unter der Wurzel ist immer positiv!

$$|\Phi\rangle = (\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)|\psi\rangle$$
$$\Delta\hat{F}^2 = \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle$$
$$= \langle\psi|(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2|\psi\rangle$$

$\hat{F}$ hermitesch, $\langle\hat{F}\rangle$ reell!

$$= \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)\psi|\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle\psi\rangle$$
$$= \langle\Phi|\Phi\rangle \geq 0 \quad !$$

$$\Delta F = \sqrt{\Delta\hat{F}^2} = \|\Phi\|$$

Es gilt:

$\Delta F = 0 \iff |\psi\rangle$ ist ein (normierter) Eigenzustand von $\hat{F}$!

Beweis → Übung

Folgerungen

Für zwei Observablen, dargestellt durch hermitesche Operatoren $\hat{F}$ und $\hat{G}$

i) sei $[\hat{F},\hat{G}]=0$

$\Rightarrow$ $\hat{F}$ und $\hat{G}$ besitzen ein gemeinsames System von EZ!
(Theorem 3 aus II.4

$$\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle \qquad (\langle n|m\rangle=\delta_{nm})$$
$$\hat{G}|n\rangle = g_n|n\rangle$$

In einem dieser gemeinsamen EZ gilt:

$$\langle\hat{F}\rangle = \langle n|\hat{F}|n\rangle = f_n \underbrace{\langle n|n\rangle}_{1} = f_n$$
$$\langle\hat{G}\rangle = \langle n|\hat{G}|n\rangle = g_n \langle n|n\rangle = g_n$$

Unschärfen:

$$\Delta F = \sqrt{\Delta\hat{F}^2} = \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle} = \|\Phi\|$$

mit $|\Phi\rangle = (\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)|n\rangle$

$= \hat{F}|n\rangle - \langle\hat{F}\rangle|n\rangle$

$= f_n|n\rangle - f_n|n\rangle = 0$!

$\Rightarrow \Delta F = 0$

analog: $\Delta G = 0$

Man „sagt": Vertauschbare Operatoren (Observablen) sind gleichzeitig scharf (d.h. streuungsfrei) meßbar!

entsprechend

ii) $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ $\Longrightarrow$ keine gemeinsamen EZ

$\Longrightarrow$ nicht gleichzeitig scharf meßbar!

<u>Beispiele:</u>

- $[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}\hat{1}$ ⟵ kartesische Komponenten von $\underline{\hat{p}}$ und $\underline{\hat{x}}$

- freies Teilchen mit $\hat{H} = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m}$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = 0 \quad ! \qquad (k = 1,2,3)$$

(zeige das z.B. in Impulsdarstellung:

$$[\hat{H}, \hat{p}_k]\tilde{\varphi}(\underline{p}) = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m}\hat{p}_k\tilde{\varphi}(\underline{p}) - \hat{p}_k\frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m}\tilde{\varphi}(\underline{p})$$

$\underline{\hat{p}}$ wirkt multiplikativ in der Impulsdarstellung!

$$= \frac{\underline{p}^2}{2m}p_k\tilde{\varphi}(\underline{p}) - p_k\frac{\underline{p}^2}{2m}\tilde{\varphi}(\underline{p}) \Bigg)$$

$$= 0$$

allgemein:

Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}$ vertauschen, entsprechen <u>physikalischen Erhaltungsgrößen!</u>

$$\left(\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_k\rangle = 0 \right.$$

$$\left.\Longrightarrow \text{später!}\right)$$

Heisenberg'sche Unschärferelation

Betrachte zwei nicht-vertauschende Operatoren $\hat{F}$ und $\hat{G}$

Es gilt: (zur Herleitung siehe Bücher von A. Messiah, E. Fick)

$$\Delta F \cdot \Delta G \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle \right| \quad \circledast$$

Bemerkungen

i) $\circledast$ gibt eine untere Schranke für das Produkt der Unschärfen an

ii) Für zwei vertauschende Operatoren ($[\hat{F}, \hat{G}] = 0$) gilt nach $\circledast$

$$\Delta F \cdot \Delta G \geq 0$$

wobei $\Delta F \cdot \Delta G = 0$ genau dann, wenn der betrachtete Zustand ein gemeinsamer EZ der beiden Operatoren ist!

iii) Spezialfall Orts-Impuls-Unschärferelation

$$\left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{p}_i, \hat{x}_k] \rangle \right| = \left| \frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \delta_{ik} \underbrace{\langle 1 \rangle}_{1} \right| = \frac{\hbar}{2} \delta_{ik}$$

Einsetzen in $\circledast$

$$\Rightarrow \Delta p_i \, \Delta x_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ik}$$

III. 6. Meßprozesse

a) Ausgang von Messungen

Betrachte quantenmechanisches System mit bekanntem Zustand $|\psi\rangle$ und messe die Observable A (Energie, magnet. Moment) (bzw. Operator $\hat{A}$)

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Mittelwert über sehr viele Messungen mit identisch präparierten Ausgangszuständen $|\psi\rangle$

d.h. ist die Messung nicht streuungsfrei,

d.h. $\Delta A > 0$

Sei speziell $\Delta A = 0$

(d.h. alle Einzel-Messungen ergeben genau dasselbe Meßergebnis)

$\Longleftrightarrow$ Zustand $|\psi\rangle$ vor der Messung war ein EZ von $\hat{A}$

und $\langle \hat{A} \rangle = a_\psi$ ← Eigenwert von $\hat{A}$ zum Zustand $|\psi\rangle$

d.h. $\hat{A}|\psi\rangle = a_\psi |\psi\rangle$

b) Einfluss von Messungen auf den Zustand des Systems

betrachte folgenden hypothetischen Meßprozess:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{Ergebnis } A']{\text{1. Messung von } \hat{A}} |\psi'\rangle \xrightarrow[\text{Ergebnis } A'']{\text{2. Messung von } \hat{A}} |\psi''\rangle$$

Ausgangszustand

Zustand nach der ersten Messung

Zustand des Systems nach der 2. Messung

Experimentell findet man (Konsistent mit der Erwartung)

$$A'' = A'$$

d.h., die zweite Messung ist störungsfrei

Das kann nur sein, falls $|\psi'\rangle$ ein EZ von $\hat{A}$ ist und $A'' = A'$ der zugehörige Eigenwert von $\hat{A}$!