Wh:

Matrixelement eines Operators

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

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

Skalarprodukt

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

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

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

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

$$= \langle \psi_2 | \hat{A}\psi_1 \rangle^*$$ (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 (EZ) („Eigenket") von $\hat{A}$, falls gilt:

$$(*) \quad \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad \text{mit } a \in \mathbb{C}$$

„Eigenwert" (EW)

Beispiele:

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

$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ } verallgemeinerte

$\hat{\underline{r}}|\underline{r}\rangle = \underline{r}|\underline{r}\rangle$

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

$\langle a|\hat{A}|a\rangle$ reell oder komplex

Spezialfall: $\hat{A}$ ist hermitesch

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

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

<u>Theorem 1</u>: Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell!

<u>Theorem 2</u>: Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal!

Zeige das anhand eines Operators mit „diskretem Spektrum"

$\hat{f}|n\rangle = f_n|n\rangle$
$\hat{f}|m\rangle = f_m|m\rangle$
mit $|n\rangle, |m\rangle$ Eigenzustände
$f_n \neq f_m$

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

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

$= f_m^* \langle n|m\rangle^*$

$= f_m \langle m|n\rangle$ (2)

Theorem 1

(1) − (2) $\Rightarrow 0 = \underbrace{(f_n - f_m)}_{\neq 0} \langle m|n\rangle \Rightarrow \langle m|n\rangle = 0$

$\Rightarrow |m\rangle, |n\rangle$ 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

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

„Quantenzahlen" (n, α_i)

Grad der Entartung (m)

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

$\Longrightarrow$ Wasserstoffatom

Energien $E_n \sim -\frac{1}{n^2}$ $\quad n$ „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!

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

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: $\Delta\hat{F}^2 = \langle\hat{F}^2\rangle - \langle\hat{F}\rangle^2$

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

$$(= \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle)$$

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!

$$= \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)\psi|\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle\psi\rangle$$

$$= \langle\phi|\phi\rangle \geq 0 \ !$$

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

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 III.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: „Verttauschbare 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!

Beispiele:

- $[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik} \hat{1}$

p_i, x_k: kartesische Komponenten von $\vec{p}$ und $\vec{r}$

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

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

(zeige das z.B. in Impulsdarstellung:

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

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

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} p_k \hat{\varphi}(\vec{p}) - p_k \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{\varphi}(\vec{p}) = 0$$

)

allgemein:
Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}$ vertauschen, entsprechen physikalischen Erhaltungsgrößen!

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

$\Longrightarrow$ später!)

Heisenberg'sche Unschärferelation

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

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

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

Bemerkungen

i) $(*)$ gibt eine untere Schranke für das Produkt der Unschärfen an

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

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

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 $(*)$

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

III. 6. Meßprozesse

a) Ausgang von Messungen

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

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

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 streuungsfrei

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