17.04 Theo-VL

Orts- & Impulsobservablen

Ort.:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r}\, \Psi^*(\vec{r},t)\, \Psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}$$
$$= \int \Psi^*(\vec{r},t)\, \vec{r}\, \Psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}$$

$$\boxed{\hat{\vec{r}} : \Psi(\vec{r},t) \to \vec{r}\, \Psi(\vec{r},t) \text{ Multipl. mit } \vec{r}}$$

Impuls:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int p\, |\varphi(\vec{p})|^2\, d^3p$$

Betrachten wir

$$\langle p_x \rangle = \int p_x\, |\varphi(\vec{p})|^2\, d^3p$$
$$\overset{*}{=} -\int i\hbar\, \Psi^*(\vec{r})\, \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r})\, d^3r$$

$$\hat{p}_x : \Psi(\vec{r},t) \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\vec{p}} : \Psi(\vec{r},t) \to i\hbar\, \vec{\nabla}\, \Psi(\vec{r},t) \text{ Ableitung in Ortsr.}}$$

$$g_2 = \varphi(p_x)\, p\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Rightarrow f_1 = \Psi \,;\, f_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi$$

*Theorem von Parseval-Plancherel

$$\int f_1^*(r)\, f_2(r) = \int g_1^*(p_r)\, g_2(p_r) \qquad g_1 = \varphi(p_x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

Kommutatoren:

Ist die Reihenfolge der Anwendung der Observablen wichtig?

Frage: $\hat{x}\,\hat{p}_x\,\Psi(\vec{r},t) = \hat{p}_x\,\hat{x}\,\Psi(\vec{r},t)$?

$$\hat{x}\hat{p}_x\Psi = -i\hbar\, x \frac{\partial}{\partial x}\Psi$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -i\hbar\,\Psi - x\frac{\partial}{\partial x}\Psi$$

→ Reihenfolge der Anwendung von Observablen (Messungen) ist wichtig!

Die Observablen von Ort und Impuls kommutieren nicht.

Allgemein definiert man den Kommutator von zwei Observablen $\hat{A}$ und $\hat{B}$:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

falls $[\hat{A},\hat{B}] \neq$ ≙ $\hat{A}$ und $\hat{B}$ kommutieren nicht.

$[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar\,\hat{I}$ $\qquad$ $\hat{I}$:= Identität

Allgemein gilt:

$$[\hat{x}_e,\hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{e,j}\,\hat{I}$$

$$[\hat{x}_e,\hat{x}_j] = 0 = [\hat{p}_e,\hat{p}_j]$$

Andere Observablen

Korrespondenzprinzip:
Für physikalische Größen, die ein klassisches Analog haben (d.h. sie sind Funktionen von $\vec{r}, \vec{p}$) ist der Operator dieselbe Funktion $\vec{r}, \vec{p}$.

Beispiel:

physikalische Größe	Observable
Kin. Energie: $E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{H}_{kin} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
pot. Energie: $E_{pot} = V(\vec{r})$	$(V(\hat{\vec{r}})\,\Psi(\vec{r},t)) = V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r},t)$
totale Energie: $E = E_{kin} + E_{pot}$	Hamiltonoperator: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{r})$
Bahndrehimpuls: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = i\hbar\, \vec{r} \times \vec{\nabla}$

Eigenfunktionen und Eigenwerte einer Observablen:

Sei $\hat{A}$ eine Observable. $\Psi_\alpha(\vec{r}) \neq 0$ ist eine Eigenfunktion und a_α ein Eigenwert von $\hat{A}$, wenn:

$$\hat{A}\,\Psi_\alpha(\vec{r}) = a_\alpha \Psi(\vec{r}) \qquad \circledast$$

Die Eigenwerte von einem hermiteschen Operator sind reell:

Beweis:

Wir multiplizieren ⊛ mit $\psi_\alpha^*(\vec{r})$ und integrieren über den Raum:

$$\int \psi_\alpha^*(\vec{r})\left(\hat{A}\,\psi_\alpha(\vec{r})\right)d^3r = \int \psi_\alpha^*(\vec{r})\, a_\alpha\, \psi_\alpha(\vec{r})$$

$$= a_\alpha \int |\psi_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r$$

$$\Big\|$$

$$\int \left(\hat{A}\,\psi_\alpha(\vec{r})\right)^* \psi_\alpha(\vec{r})\, d^3r = \int a_\alpha^*\, \psi_\alpha^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})\, d^3r$$

$$= a_\alpha^* \int |\psi_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r$$

$\Rightarrow a_\alpha = a_\alpha^* \Rightarrow a_\alpha$ ist reell!

Außerdem folgt:

$$a_\alpha = \int \psi_\alpha^*(\vec{r})\left(\hat{A}\,\psi_\alpha(\vec{r})\right)d^3r \cdot \left(\int |\psi_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r\right)^{-1}$$

Beispiel einer Eigenfkt: $\hat{p} = i\hbar\vec{\nabla}$

Eigenfunktionen sind ebene Wellen $\psi_{p_r}(\vec{r}) = e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}$

<u>Mögliche Resultate einer Messung</u>

Experimentelle Evidenz:

$$\boxed{\psi(\vec{r},t_1)} \xrightarrow[\text{von } A]{\text{Mess.}} \underset{t_2 = t_1 + \varepsilon}{\boxed{\psi(\vec{r},t_2)}} \xrightarrow[\text{von } A]{\text{Mess.}} \underset{t_3 = t_2 + \varepsilon}{\boxed{\psi(\vec{r},t_3)}}$$

Res. a_1 Res. a_1 mit $p=1$*

*p = Wahrsch.

Zustand muss durch die erste Messung von A geändert worden sein.

Der neue Zustand $\psi(\vec{r},t_2)$ ist ein Zustand für den die Messung A ein einziges Resultat mit $p=1$ gibt.

Theorem:

Die Messung der physikalischen Größe A zu einem Zeitpkt. t gibt das Resultat a mit der Wahrsch. 1, genau dann wenn die Wellenfkt. zur Zeit t eine Eigenfkt. $\Psi_\alpha(\vec{r})$ der Observablen $\hat{A}$ ist.

Der Wert ist der Eigenwert assoziiert mit $\Psi_\alpha(\vec{r})$, d.h. $a = a_\alpha$

Beweis '$\Leftarrow$'

$$\langle a \rangle = \int \Psi^*_\alpha(\vec{r}) \left(\hat{A}\, \Psi_\alpha(\vec{r})\right) d^3r$$

$$= a_\alpha \int |\Psi_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r$$

Ψ_α ist normiert

$$= a_\alpha$$

$\Rightarrow \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 = 0$

'$\Rightarrow$' später.

Das Resultat a_α einer Messung von A ist ein Eigenwert von $\hat{A}$ und der Zustand nach der Messung ist der Eigenzustand Ψ_α

Wenn der Zustand $\Psi(\vec{r}, t_1)$ vor der Messung keine Eigenfkt. ist, wird er durch die Messung in einen solchen gebracht!

Man nennt dieses die Projektion / Reduktion der Wellenfkt.

$$\Psi \xrightarrow{\hat{A}} \tilde{\Psi} \xrightarrow{\hat{B}} \tilde{\tilde{\Psi}} \xrightarrow{\hat{A}} \tilde{\tilde{\tilde{\Psi}}}$$

EF von A, EW a_1 — EF von B, EW b_1 — EF von A, EW a_2 unklar!

↳ Messungen können benutzt werden um gewünschte Zustände zu präparieren.

Wahrscheinlichkeit eines Resultats

Der Erwartungswert einer Observablen $\hat{A}$ kann geschrieben werden als:

$$\langle a \rangle = \sum_\alpha p_\alpha a_\alpha$$

Dabei ist a_α der Eigenwert von $\hat{A}$ mit $\sum_\alpha p_\alpha = 1$
Wir zeigen, dass wenn die Eigenwerte a_α nicht entartet sind:

$$p_\alpha = \frac{\left| \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) \psi(\vec{r},t) \, d^3r \right|^2}{\int |\psi_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r}$$

Prinzipien der QM:

III: Klassisch

Messresultat physikalischer Größen sind Fkt. von $\vec{r}$ und $\vec{p}$

QM

Zu jeder Größe A kann Observable $\hat{A}$ assoziert werden, die ein linear, hermitescher Operator ist.

Wenn d. Zustand des Teilchens durch ψ beschrieben wird ist der Erwartungswert $\langle a \rangle$ der Messung von A zur Zeit t:

$$\langle a \rangle_t = \int \psi^* (\hat{A} \psi) \, d^3r$$

IV

Nach einer Messung ist der Zustand des Sytems eine Eigenfkt. von $\hat{A}$.