

## 1.5 QM - Formalismus

### 1.5.1 QM - Operatoren und Observablen

Betrachte Wasserstoff:

Schrödinger-Gl. für Wellenfunktion

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) = E_n \psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$$

$\Rightarrow$  als Eigenwert-Gl.

$$\hat{H} |n, l, m_l\rangle = E_n |n, l, m_l\rangle$$

- Der Zustand  $|n, l, m_l\rangle$  ist Eigenzustand des Operators  $\hat{H}$  mit Eigenenergie  $E_n$
- Die Wellenfunktion  $\psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$  ist die Darstellung des Zustands  $|n, l, m_l\rangle$  im Ortsraum.

$$\tilde{\psi}_{n,l,m_l}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} d\vec{r}$$

ist die entsprechende Darstellung im Impulsraum.

(siehe Materiewellen:

Fouriertrafo = Entwicklung nach ebenen Wellen)

# Operator - Formulierung der Quantenmechanik:

- Der Zustand eines geschlossenen Quantensystems wird beschrieben durch einen Zustands-Vektor  $|\psi\rangle$
- Alle möglichen Zustände  $\{|\psi\rangle\}$  spannen einen Vektorraum - den Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Systems auf

$\Rightarrow$  lin. Algebra:

- Skalarprodukt:  $\langle \psi | \phi \rangle$
- Normierbarkeit:  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$
- Linearität:  $\alpha |\psi\rangle + \beta |\phi\rangle$  ist auch ein Zustand  
 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

- phys. Größen - "Observablen" - entsprechen Operatoren im Hilbert-Raum
- mögliche Messwerte entsprechen den Eigenwerten des Operators

BSP: Die Energie - Eigenzustände des Teilchens  
sind gegeben durch die Eigenwertgleichung

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

- Der "Hamiltonian" = Hamilton - Operator  
eines Teilchens in einem Potential  $V(\vec{r})$   
gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

- Allg.: Die Eigenzustände einer Observablen  
bilden eine Orthonormalbasis

BSP: Wasserstoff

- $|\psi\rangle = \sum_{n,l,m} c_{n,l,m} |n, l, m\rangle$   
(diskret unendl. Basis)

- $\langle n, l, m | n', l', m' \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$

- Orts- und Impulsoperatoren

$$x\text{-Position} \quad x \rightarrow \hat{x}$$

$$\text{Impulskomponente} \quad p_x \rightarrow \hat{p}_x$$

Vektoroperatoren = Vektor aus Operatoren

$$\vec{\hat{r}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \quad \vec{\hat{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix}$$

- Die Schrödinger-Gl. ist die Ortsdarstellung der Hamilton-Operator-Gleichung.

Durch Vergleich des Hamiltonian und der SGL finden wir die Ortsdarstellungen für  $\vec{\hat{r}}$  und  $\vec{\hat{p}}$ :

Ortsoperator:

$$\vec{\hat{r}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{O.D.}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\text{z. B.} \quad \hat{x} \psi(\vec{r}) = x \psi(\vec{r})$$

(kontinuierliche Basis:  $\sum_x \rightarrow \int dx$ )

Impulsoperator:

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$$

$$\rightarrow -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{p} = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{O.D.}} \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\text{z.B.: } \hat{p}_z \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(\vec{r})$$

## 1.5.2 QM-Messung und Erwartungswert

Operator-Version von QM-Postulat 3:

(Bornsche Regel)

Die Messung einer Observablen  $\hat{O}$

mit Eigenwerten und -zuständen gegeben durch

$$\hat{O} |O_n\rangle = O_n |O_n\rangle$$

an einem Zustand  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |O_n\rangle$

- existiert mit Wahrscheinlichkeit  $P_m = |c_m|^2$  das Ergebnis  $O_m$
- verändert / projiziert das System instantan  
 $|14\rangle \rightarrow |0_n\rangle$   
 in den zugehörigen Eigenzustand

Die Theorie macht nur statistische Aussagen:

- Der Erwartungswert (Mittelwert) einer Observablen für ein Zustand  $\psi$  ist gegeben durch

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

$$\stackrel{\text{O.D.}}{\rightarrow} \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{O} \psi(\vec{r}, t)$$

$\Rightarrow$  Ist  $|\psi\rangle$  Eigenzustand von  $\hat{O}$ , ist der Meßwert "scharf"

BSP: Wasserstoff Zustand  $|n, l, m\rangle$

$$\langle n, l, m | \hat{H} | n, l, m \rangle$$

$$= E_n \underbrace{\langle n, l, m | n, l, m \rangle}_{=1}$$

= 1 Zustand ist normiert

$$= E_n$$

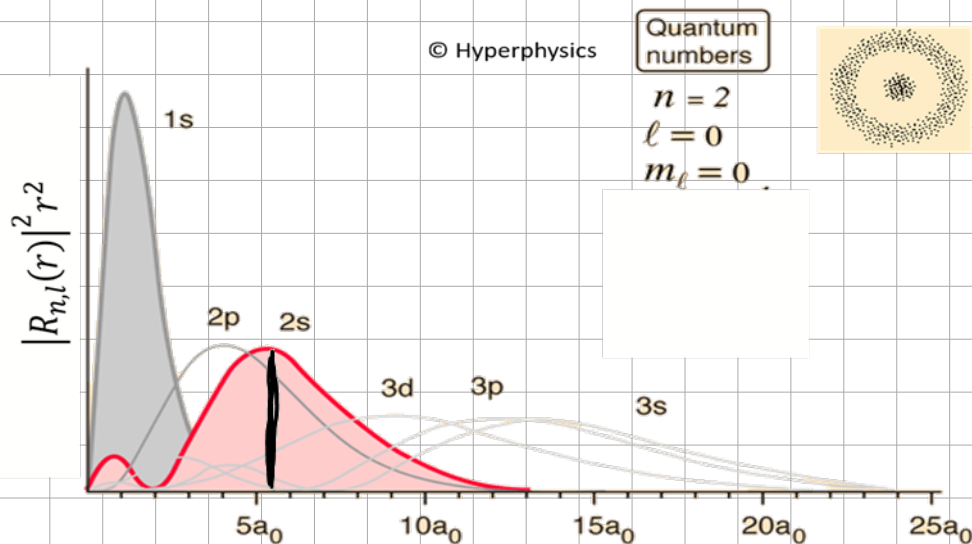
$\Leftrightarrow$  Wiederholte Messungen liefern immer  
exakt dieses Ergebnis

Beispiel für eine "unscharfe" Messung:  
Abstand  $e \leftrightarrow p$  in Wasserstoff

$$\langle \hat{r} \rangle = \langle n, l, m_l | \hat{r} | n, l, m_l \rangle$$

entsprechend  $\rightarrow \int \psi_{n,l,m_l}^* \hat{r} \psi_{n,l,m_l} dV$

$$= a_0 n^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right)$$



BSP:  $\psi_{200}$

$$\Rightarrow \langle r \rangle = 6a_0$$

Unschärfe: ( für einen Zustand  $\psi$  in Bezug auf  
Observable  $\hat{O}$  )

$$(\Delta \hat{O})_\psi^2 = \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \hat{O}^2 - 2\hat{O}\langle\hat{O}\rangle + \langle\hat{O}\rangle^2 \rangle_4 \\
&= \langle \hat{O}^2 \rangle_4 - \langle\hat{O}\rangle_4^2 \\
&= \langle 4|\hat{O}^2|4\rangle - \langle 4|\hat{O}|4\rangle^2
\end{aligned}$$

anscheiner Erwartungswert  $\Leftrightarrow \langle \hat{O}^2 \rangle_4 \neq \langle\hat{O}\rangle_4^2$   
 $\Leftrightarrow |4\rangle$  ist nicht Eigenzustand von  $\hat{O}$

### 1.5.3 Kommutatoren und Messungen

Def.: für zwei Operatoren  $\hat{F}, \hat{G}$  ist  
 der Kommutator:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F}$$

(auch ein Operator)

Die Erwartungswerte von zwei Observablen  $\hat{F}, \hat{G}$   
 eines Zustands  $|4\rangle$  sind genau dann gleichzeitig  
 scharf, wenn

$$[\hat{F}, \hat{G}]|4\rangle = \hat{F}\hat{G}|4\rangle - \hat{G}\hat{F}|4\rangle = 0$$

$\Leftrightarrow$  die Reihenfolge der zwei Messungen ist egal



Ort und Impuls:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] |\psi\rangle = \hat{x} \hat{p}_x |\psi\rangle - \hat{p}_x \hat{x} |\psi\rangle$$

$$\stackrel{\text{O.D.}}{\longrightarrow} -x \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \cdot \psi(\vec{r}))$$

$$= -x \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) + i\hbar \psi(\vec{r}) + x \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r})$$

$$= i\hbar \psi(\vec{r})$$

darst. frei  
 $\longrightarrow$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] |\psi\rangle = i\hbar |\psi\rangle$$

$\Rightarrow$  Es gibt keinen QM-Zustand (Wellenpaket)

für den die x-Komponenten von Ort  
und Impuls gleichzeitig scharf meßbar sind

$\Rightarrow$  Daraus folgt die "Orts - Impuls - Unschärfe"

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\Delta x^2} \cdot \sqrt{\Delta p_x^2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

die wir für Wellenpakete schon (qualitativ)  
diskutiert haben.

Bem 1: Heisenbergs Orts-Impuls-Unschärfe ist nur eins von vielen Beispielen für Unschärfenrelationen zwischen nicht vertauschenden QM-Observablen

Allgemein:

$$(\Delta F)_\psi^2 \cdot (\Delta G)_\psi^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle_\psi|^2$$

Bem 2: Mit  $E = \hbar \omega$  wird aus der Frequenz-Zeit-"Unschärfe"

$$(*) \quad \Delta \omega \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (**)$$

(\*) kommt - komplett klassisch - aus der Fourier-Transformation:

Die Frequenz / Wellenlänge einer Welle mit Genauigkeit  $\Delta \omega$  zu messen, erfordert  $\sim \Delta t$  Zeit.

(\*\*) sieht man aus wie eine QM-Unschärfenrel., folgt aber aus einer Kommutator-Relation, weil die Zeit  $t$  kein Operator ist!

Nochmal zurück zur Frage:

Was ist eine QM - Messung? (Postulat 3)

(1) experimentelle Aussage: ein (plötzlicher) Kontakt mit einem "makroskopischen" Meßgerät

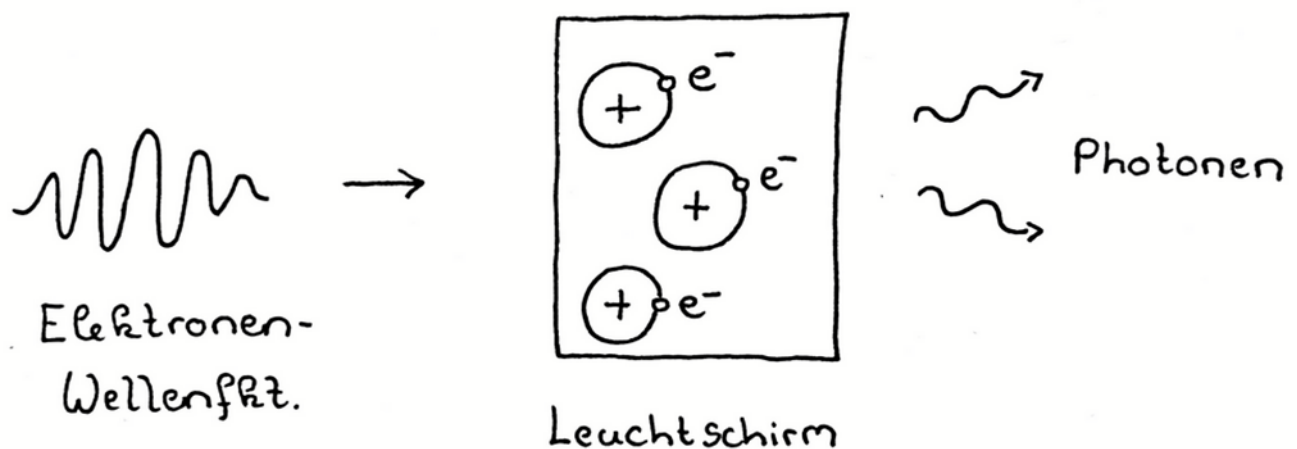
BSP: Elektron / Atom auf Leuchtschirm

(2) formale Aussage: Anwendung eines Operators

$$\hat{O}|4\rangle = 0|4\rangle$$

Etwas präziser: (2) ist als fundamentales Konzept richtig. In nahezu allen Experimenten ist der Meßprozess aber kompliziert.

BSP: Elektronenbeugung



mikroskopisch:

inelastische Streuung des  $e^-$ -Wellenpakets  
an Zuständen der Elektronen in Atomen im  
Leuchtschirm + Wechselwirkung zwischen  
Atomen + spontaner Zerfall angeregter Atome  
 $\Rightarrow$  prinzipiell alles erklärbar durch QM-  
Formalismus

praktisch: beobachtbares Licht aus der Region,  
wo das Elektron auf den Schirm trifft.

Das Wellenpaket ist danach "weg"

$\Leftrightarrow$  das Elektron ist irgendwo im Festkörper

"Kollaps der Wellenfunktion"

$\hookrightarrow$  hieraus folgt hauptsächlich die  
(unfängliche) Verwirrung über QM

"quantum to classical transition"

"offene Quantensysteme"

"Dekohärenz"

sind aktuelle Themen der QM

in Experiment und Theorie

Insbesondere gibt es (wenige) experimentelle Beispiele,  
die Messungen in "reiner" QM-Form (2) demonstrieren  
"quantum non-demolition measurements"

QND

$\Leftrightarrow$  Das Quantensystem ist danach noch da,  
im Eigenzustand  $| \psi_0 \rangle$  zum gemessenen Eigenwert  
 $0$  der Observablen  $\hat{O}$