

Struktur der QM

(1) Der Zustand eines quantenmechanischen Systems (Teilchen, Atom, Molekül etc.) wird durch eine quadratintegrierbare Funktion

$$\psi(\vec{x}, t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \in L_2(\mathbb{R}^3)$$

beschrieben. In folgender Normierung wie Sie auf

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1$$

Die Funktion

$$P(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

gibt dann die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ψ an, d.h.

$P(\vec{x}, t) d^3x$ ist die Wkt. das Teilchen bei \vec{x} innerhalb eines kleinen Volumens d^3x zu finden (Ortsmessung).

(2) Die Observablen des Systems werden durch hermitesche (genauer selbstadjungierte Operatoren) repräsentiert.

Beispiele:

Ortskoordinaten: \vec{x}	$\hat{x} \psi(\vec{x}, t) = \vec{x} \psi(\vec{x}, t)$
Impulskoordinaten: \vec{p}	$\hat{p} \psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi(\vec{x}, t)$
Drehimpuls: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$	$\vec{L} \psi(\vec{x}, t) = \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi(\vec{x}, t)$

(3) Mögliche Meßwerte einer Observablen O , repräsentiert durch den hermiteschen Operator \hat{O} sind die Eigenwerte dieses Operators. Seien $\psi_{O_n}(\vec{x})$ die dazu gehörigen Eigenvektoren:

$$\hat{O} \psi_{O_n}(\vec{x}) = O_n \psi_{O_n}(\vec{x}) \quad (\text{A numeriert die evtl. verschiedenen mehrfachen Eigenzustände zu } \hat{O} \text{ durch})$$

Sie bilden ein vollst. Orthonormalsystem. Dabei können die Eigenwerte sowohl kontinuierlich (wie bei \vec{p} und \vec{p}^2) als auch diskret (z.B. beim Drehimpuls \vec{L}^2 und L_z) sein. Im folgenden nehmen wir an, die Eigenfunktionen sind wie folgt normiert:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_{o, \mu}^*(\vec{x}) \psi_{o', \mu'}(\vec{x}) = \delta(o-o') \delta(\mu-\mu')$$

Wobei die δ -Funktionen auch für kontinuierliche δ 's stehen können, falls o und μ - diskrete Variable sind. Die Wellenfunktion läßt sich dann nach Eigenzuständen von \hat{O} entwickeln:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d\mu \int d\mu' C(o, \mu; t) \psi_{o, \mu}(\vec{x})$$

wo die Integrale über die möglichen Werte von o und μ zu nehmen sind. Für die Koeffizienten gilt:

$$C(o, \mu; t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_{o, \mu}^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t)$$

- (4) Ist das System im Zustand ψ präpariert, so ist die Wsk bei der Messung der Observablen O , den Wert o zu messen, $P(o, t) = \int d\mu |C(o, \mu; t)|^2$. (Born'sche Wsk.-Interpretation der Wellenfkt.)
- (5) Es existiert ein Operator \hat{H} , der der Energie (Hamiltonfunktion) des Systems entspricht, deren Zeitentwicklung der Lf. ansieht

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t)$$

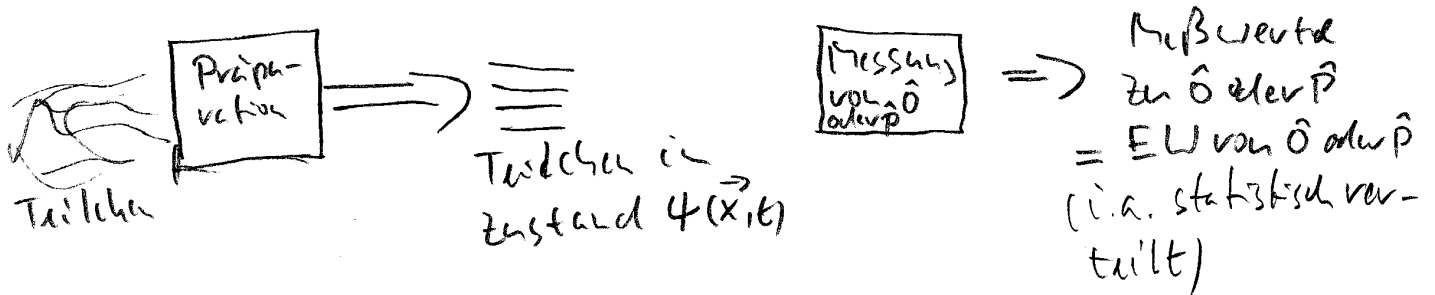
(zeitabh. Schrödingergleichung).
 Falls \hat{H} nicht explizit zeitabh. ist, ist eine (formale)

Lösung
$$\psi(\vec{x}, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t) \psi(\vec{x}, t=0)$$

"Simultane" Messungen

(3)

Da die QM i.a. nur Wsk.-Aussagen macht, müssen bei ihrer experimentellen Überprüfung eine große Zahl von Systemen (voneinander unabhängig) immer gleichzeitig präpariert werden. Dann können an jedem System beliebige Observablen gemessen werden!



Wir messen also zunächst \hat{O} an hinreichend vielen gleichzeitig präparierten Systemen, so daß wir die Statistik für die möglichen Meßwerte von \hat{O} (die stets Eigenwerte von \hat{O} sein müssen). Nach Postulat (3) und (4) kann \hat{O} nur dann einen wohlbestimmten Wert o besitzen wenn $\psi = \vec{v}_o(\vec{x})$ (wobei wir annehmen, daß die EVe von \hat{O} nicht entartet sind (zur Vereinfachung)).
Dann können wir dasselbe für \hat{P} durchführen, wieder an dem in Zustand ψ präparierten Teilchen!

Unschärfrelation

Für die Messung zweier Observablen an im Zustand ψ präparierten Systemen, gilt die Heisenbergsche Unschärfrelation

$$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{P})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{Q} \rangle^2$$

mit $\hat{Q} = \frac{1}{i} [\hat{O}, \hat{P}]$

und $\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi^*(\vec{x}) \hat{O}^2 \psi(\vec{x}) - \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi^*(\vec{x}) \hat{O} \psi(\vec{x}) \right)^2$

Die Eigenwerte von \hat{O} und \hat{P} können nur dann simultan durch Präparation der Teilchen im Zustand ψ determiniert sein, wenn

$$[\hat{O}, \hat{P}] = 0,$$

d. h. wenn \hat{O} und \hat{P} kommutieren.

Sie können es nur dann sein, wenn ψ gleichzeitig Eigenvektor zu \hat{O} und \hat{P} ist. Es wurde in der vorher. Vl. gezeigt, daß

$$[\hat{O}, \hat{P}] = 0 \Leftrightarrow \exists \text{ von } \hat{O} \text{ und } \hat{P} \text{ simultaner EV}$$

Vollständiger Satz kommutierender Observablen

Zwei Observablen \hat{O} und \hat{P} heißen kompatibel, wenn es Zustände gibt, in denen sie simultan exakt determiniert sind, d. h. wenn $[\hat{O}, \hat{P}] = 0$ ist.

Ein Satz von Observablen $(\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n)$ heißt ein vollständiger Satz von Operatoren, wenn kommutierender Satz von Operatoren, wenn $[\hat{O}_j, \hat{O}_k] = 0$ für alle $j, k \in \{1, \dots, n\}$

und zu jedem n -Tupel

von Eigenwerten (o_1, o_2, \dots, o_n) ^{nur genau} ein (bis auf einen Faktor) den eindeutig bestimmter simultaner Eigenvektor $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ existiert.

Beispiele

(1) Orts- und Impulsoperatoren

$$\hat{x} \psi(x) = x \psi(x) \quad \hat{p} \psi(x) = -i \hbar \psi'(x)$$

Da $[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0$, können die \vec{x} -Komponenten simultan determiniert sein $\Rightarrow \exists$ simultane Eigenzustände

$$\Rightarrow (\vec{x} - \vec{x}_0) \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = 0$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = A(\vec{x}_0) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

$$\langle \psi_{\vec{x}_0} | \psi_{\vec{x}_0} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} A(\vec{x}_0)^* \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0) A(\vec{x}_0) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

$$= |A(\vec{x}_0)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

$$\Rightarrow |A(\vec{x}_0)|^2 = 1 \Rightarrow \psi_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

(b) Impuls eigenfunktionen

$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \Rightarrow \exists$ simultane Eigenzustände für drei Komponenten von \hat{p} .

$$\hat{p} \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) \stackrel{!}{=} \vec{p} \psi_{\vec{p}}(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = A(\vec{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

$$\langle \psi_{\vec{p}'} | \psi_{\vec{p}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \psi_{\vec{p}}(\vec{x})$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} A(\vec{p}')^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}\right) \cdot A(\vec{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} A(\vec{p}')^* A(\vec{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p} - \vec{p}')\right]$$

$$= |A(\vec{p}')|^2 (2\pi\hbar)^3 \int_{\mathbb{R}^3} \delta\left(\frac{\vec{p} - \vec{p}'}{\hbar}\right)$$

$$= |A(\vec{p}')|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\Rightarrow A(\vec{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \Rightarrow \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

(c) Drehimpuls

(56)

In der vorigen Übung haben wir gesehen, daß

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \neq 0,$$

d.h. die drei Komponenten des Drehimpulses können nicht
simultan determiniert sein. Wir haben weiter gesehen, daß

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0 \text{ für alle } j \in \{1, 2, 3\}$$

ist. Wir können also \hat{L}^2 und \hat{L}_z simultan bestimmen.

Für einen vollständigen Satz benötigen wir noch eine Observable, die
mit \hat{L}^2 und \hat{L}_z kommutiert, z.B. $\psi = |\vec{x}|$ oder $\psi^2 = |\vec{p}|$.

Jeder falls ist mit \hat{L}^2 und \hat{L}_z der Drehimpuls in x,y-Richtung
unbestimmt. Er präzediert \hat{L}_z zu sagen um die z-Richtung



Aufwachen der folgenden Messung an

6

Angenommen wir messen eine observable \hat{O} mit Resultat o_n zur Zeit t . Angenommen o_n ist nicht entartet, so ist das System im Zustand ψ_{o_n} zur Zeit t . Die Wellenfunktion entwickelt sich nach der Schrödingergleichung:

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad \psi(\vec{x}, t=0) = \psi_n(\vec{x})$$

Seien nun $\psi_n(\vec{x})$ die vollst. DNS von Energieeigenvektoren

$$\hat{H} \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x})$$

Dann gilt

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{iE_n t / \hbar} \psi_n(\vec{x})$$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) \psi_n(\vec{x}) = \sum_n c_n(t) \hat{H} \psi_n(\vec{x})$$

$$= \sum_n E_n c_n(t) \psi_n(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \dot{c}_n = -\frac{i}{\hbar} E_n c_n$$

$$\Rightarrow c_n(t) = c_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(\vec{x}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

$$\text{Aus} \quad \psi(\vec{x}, t=0) = \psi_n(\vec{x})$$

$$\text{folgt} \quad c_n = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi_n^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x})$$

Messen wir zur Zeit $t > 0$ eine Observable \hat{P} und erhalten den Eigenwert p_n zur ET $\tilde{\psi}_n(\vec{x})$, so ist dieser Wert selbst für $[\hat{O}, \hat{P}] = 0$ nicht eindeutig determiniert, denn

die Wsk. dafür ist:

$$P_{P_n}(t) = \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \tilde{\varphi}_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right|^2$$

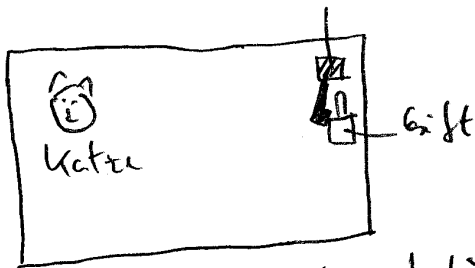
$$= \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \tilde{\varphi}_n^*(\vec{x}) \sum_R c_R \psi_R(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_R t\right) \right|^2$$

$$= \left| \sum_R c_R \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_R t\right) \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\varphi}_n^*(\vec{x}) \psi_R(\vec{x}) \right|^2$$

In dem Fall lautet die Wellenfunktion nach der Messung von \hat{P}
 $\tilde{\varphi}_n(\vec{x}) \neq \varphi_n(\vec{x})$.

Schrödingers Katze

Radioaktiver Atomkern



Ein radioaktives Material löse bei einem Zufall einen Hammer aus, der einen Giftbehälter zerstört, was die Katze tötet. Der Kasten sei verschlossen, so daß man nicht weiß ob die Katze noch lebt. Sei die zerfallsrate gerade so, daß in einer Stunde mit Wsk $\frac{1}{2}$ die Katze noch lebt. Der Zustand ist

bei $t=0$: |Atomkern, lebende Katze)

Für t gilt

$| \psi \rangle = \exp(-\lambda t) | \text{Atomkern; lebende Katze} \rangle$

$[1 - \exp(-\lambda t)] | \text{zerfallener Atomkern; tote Katze} \rangle$

Die Katze ist also weder tot noch lebendig, sondern in einem Überlagerungszustand zwischen "lebendig" und "tot". Bis ein Beobachter den Kasten öffnet. Dann ist die WSK wieder 1 falls die Katze noch lebt oder 0 falls sie tot ist. Es ist also



Falls Katze bei $t=1h$ noch lebt

Falls Katze bei $t=1h$ tot ist.

Scheinbares Paradoxon löst sich auf, wenn man die Wellenfunktion nicht der einzelnen Katze zuordnet, sondern nur einem Ensemble immer gleich präparierter Anordnungen.
Zweit abhängigkeit von Erwartungswerten

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^*(\vec{x}, t) \hat{O} \psi(\vec{x}, t)$$

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \tilde{u}_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \quad (\text{S.O.})$$

$$= \sum_n \underbrace{\int d^3\vec{x}' \tilde{u}_n^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}', 0)}_{c_n} \tilde{u}_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

$$= \int d^3\vec{x}' \underbrace{\sum_n \tilde{u}_n^*(\vec{x}') \tilde{u}_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)}_{G(\vec{x}, t; \vec{x}', t=0)} \psi(\vec{x}', t=0)$$

$$= \int d^3\vec{x}' G(\vec{x}, t; \vec{x}', t=0) \psi(\vec{x}', t=0)$$

$G(\vec{x}, t; \vec{x}', t=0)$: Propagator oder Greensche Funktion der Schwingungsgleichung.

$$\langle \hat{O} \rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \hat{O} \psi(\vec{x}, t)$$

$\hat{O} = \hat{O}(\vec{x}, \vec{p}, t)$
 \vec{x}, \vec{p} zeit unabhängig ("Schrödingerbild der Zeitentwicklung" - Allgemeine Bolden können später)
 \hat{O} explizite zeitabhängigkeit

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \int d^3x \left[\partial_t \psi^*(\vec{x}, t) \hat{O} \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) (\partial_t \hat{O}) \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \hat{O} \partial_t \psi(\vec{x}, t) \right]$$

Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad \hat{H} \text{ hermitesch}$$

$$\Rightarrow -i\hbar \partial_t \psi^*(x, t) = \hat{H}^\dagger \psi^*(x, t) = \hat{H} \psi^*(x, t)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \int d^3x \left[\frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi^*(\vec{x}, t)) \hat{O} \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) (\partial_t \hat{O}) \psi(\vec{x}, t) - \frac{i}{\hbar} \psi^*(\vec{x}, t) \hat{O} \hat{H} \psi(\vec{x}, t) \right]$$

$$= \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \left[\frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H}) + (\partial_t \hat{O}) \right] \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}] + \partial_t \hat{O} \right\rangle$$

$$= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] + \partial_t \hat{O} \right\rangle$$

Ist also \hat{O} der Operator, der der Observablen O zugeordnet ist, dann ist es sinnvoll den Observablen

(10)

$$\dot{O} = \frac{dO}{dt}$$

den Operator

$$\dot{\hat{O}} := \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{O}}{\partial t}$$

Zu zugeordnet.
ACHTUNG! $\dot{\hat{O}}$ ist $\neq \frac{d\hat{O}}{dt}$!

Es gilt also

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \langle \dot{\hat{O}} \rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle$$

für jeden Zustand $\psi(x, t)$. Heisenbergsche Bewegungsgl.
 für Erwartungswerte.

Falls $\hat{O} = \hat{O}(\vec{x}, \vec{p})$ nicht expl. zeitabhängig und

$$\psi(x, t) = \psi_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

ein stationärer Zustand ist, folgt

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \left\{ \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] \right\} \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3x \psi_n^*(\vec{x}) \exp(+\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

$$\left\{ \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] \right\} \psi_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

$$= \int d^3x \psi_n^*(\vec{x}) \frac{1}{i\hbar} (\hat{O} \hat{H} - \hat{H} \hat{O}) \psi_n(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \int d^3 \vec{x} \left\{ \psi_n^*(\vec{x}) \frac{1}{i\hbar} \hat{O} \hat{H} \psi_n(\vec{x}) \right. \\ \left. - \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hat{H} \psi_n(\vec{x})}{E_n \psi_n(\vec{x})} \right]^* \hat{O} \psi_n(\vec{x}) \right\} \quad (11)$$

$$= \int d^3 \vec{x} \frac{1}{i\hbar} \left[\psi_n^*(\vec{x}) \hat{O} E_n \psi_n(\vec{x}) - \psi_n^*(\vec{x}) E_n \hat{O} \psi_n(\vec{x}) \right]$$

$$= 0$$

\Rightarrow Falls $\hat{O} = 0$ und $\psi(x,t)$ stationärer Zustand, dann sind Erwartungswerte zeitabhängig.

Da dann auch die EN $\psi_0(\vec{x})$ nicht zeitabhängig sind gilt dann für die Wsk, den EW 0 zu messen

$$P_0(t) = |\langle \psi_0 | \psi \rangle|^2$$

$$= \left| \int d^3 \vec{x} \langle \psi_0^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \right|^2$$

$$= \left| \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \int d^3 \vec{x} \langle \psi_0^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}) \right|^2$$

$$= \left| \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \right|^2 \left| \int d^3 \vec{x} \langle \psi_0^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}) \right|^2$$

$$= \left| \int d^3 \vec{x} \langle \psi_0^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}) \right|^2 = 0$$

Falls $\hat{O} = \hat{O}(\hat{x}, \hat{p})$ expl. zeitunabh. ist und mit \hat{H} vertauscht, (12)
gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{O}, \hat{H}] \right\rangle = 0$$

für alle Zustände $\psi(x,t)$. Dann repräsentiert \hat{O} eine Erhaltungsgröße. Man sagt auch \hat{O} sei ein Integral der gen. Bewegungsgr.