Skript zur 5. Vorlesung "Quantenmechanik", Montag den 2. Mai, 2011.

4.4 Darstellung

Im vorherigen Abschnitt wurden die "kets" $|F\rangle$ im Hilbertraum durch die Funktion $F(\mathbf{r})$ definiert. Ebenso kann man den ket $|F\rangle$ durch die Fourier-Transformierte $F(\mathbf{k})$ darstellen. Diese beiden Darstellungen sind völlig äquivalent.
Die "Ortsdarstellung" durch die Funktion $F(\mathbf{r})$ und die "Fourierdarstellung" durch die Funktion $F(\mathbf{k})$ sind nicht die einzigen möglichen Darstellungen des kets $|F\rangle$. Im allgemeinen bietet jeder komplette Satz von Operatoren eine mögliche Darstellung. Diese Darstellung wird so konstruiert: Seien $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$, ... ein kompletter Satz Operatoren (mit nicht-entarteten Eigenwerten $a, b, c, \ldots$). Dann wird das Element $|F\rangle$ im Hilbertraum vollständig durch die Funktion $F(a, b, c, \ldots) = \langle a, b, c, \ldots |F\rangle$ dargestellt.

Die Darstellungen $F(\mathbf{r})$ und $F(\mathbf{k})$ passen in dieses allgemeine Muster:

1. Ortsdarstellung: $F(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|F\rangle$. [Dies folgt aus $\langle \mathbf{r}|F\rangle = \int d\mathbf{r}'\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')F(\mathbf{r}') = F(\mathbf{r})$.]
2. Fourier-Darstellung: $F(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}|F\rangle$. [$F(\mathbf{k})$ ist die Fourier-Transformierte von $F(\mathbf{r})$, da $\langle \mathbf{k}|F\rangle = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{kr}} F(\mathbf{r})$.]

Ein Beispiel einer alternativen Darstellung in einer Dimension ist die "n-Darstellung", in der der ket $|F\rangle$ durch die diskrete Reihe $F(n) = \langle n|F\rangle = \int dx E_n^*(x)F(x)$ dargestellt wird.

Das Skalar-Produkt kann in jeder Darstellung berechnet werden. Im Allgemeinen gilt, dass wenn der ket $|F\rangle$ durch $F(a, b, c, \ldots) = \langle a, b, c, \ldots |F\rangle$ und der ket $|G\rangle$ durch $G(a, b, c, \ldots) = \langle a, b, c, \ldots |G\rangle$ dargestellt werden, dann

$$\langle F|G\rangle = \mathbb{S}_{a,b,c,\ldots} F^*(a, b, c, \cdots)G(a, b, c, \cdots).$$

Beweis: Dies ergibt sich direkt aus der Vollständigkeitsrelation $\mathbb{S}_{a,b,c,\ldots} |abc\cdots\rangle\langle abc\ldots| = \hat{1}$, denn

$$\begin{aligned} \langle F|G\rangle &= \mathbb{S}_{a,b,c,\ldots} \langle F|abc\ldots\rangle\langle abc\ldots|G\rangle \\ &= \mathbb{S}_{a,b,c,\ldots} F^*(a, b, c, \ldots)G(a, b, c, \ldots). \end{aligned}$$

Bemerkung: Parsevalsches Theorem

$$\int d\mathbf{r} F^*(\mathbf{r})G(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} F^*(\mathbf{k})G(\mathbf{k})$$

ist nichts anderes als die Beobachtung, dass das Skalarprodukt $\langle F|G\rangle$ sowohl in der Ortsdarstellung als auch in der Fourierdarstellung ausgerechnet werden kann!

5 Postulate der Quantenmechanik

5.1 Zustand

Postulat: Ein Zustand wird durch einen ket $|\psi\rangle$ im Hilbertraum beschrieben. (Hilbertraum: Komplexer Vektorraum der quadratintegrablen Funktionen in drei Dimensionen.)
Ein Ket $|\psi\rangle$ wird durch die "Wellenfunktion" $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\psi\rangle$ dargestellt. Kets $|\psi\rangle$ und $\lambda|\psi\rangle$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$ beschreiben den gleichen Zustand.

5.2 Observable

Postulat: Eine messbare physikalische Größe (Observable) A wird durch einen hermiteschen Operator $\hat{A}$ beschrieben. In der klassischen Mechanik ist A eine Funktion des Impulses $\mathbf{p}$ und des Ortes $\mathbf{r}$. Der Observablen $A(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ in der klassischen Theorie wird dann der Operator $\hat{A} = A(\hbar\,\hat{\mathbf{k}}\,,\,\hat{\mathbf{r}}\,)$ zugeordnet.

Bemerkung: Diese Zuordnung ist nicht immer eindeutig, da die klassischen Variablen $\mathbf{r}$ und $\mathbf{p}$ vertauschbar sind, während die Operatoren $\hat{\mathbf{r}}$ und $\hbar\hat{\mathbf{k}}$ nicht vertauschbar sind. Daher ist es z.B. nicht eindeutig, welcher Operator dem Produkt $xp_x = p_x x$ zugeordnet werden muss, da $\hat{x}(\hbar\hat{k}_x) \neq (\hbar\hat{k}_x)\hat{x}$. Dieses Problem wird bei den Beispielen die wir in dieser Vorlesung besprechen jedoch nicht auftreten. In den Fällen, dass der Operator $\hat{A}$ nicht eindeutig ist, lässt sich $\hat{A}$ manchmal dadurch bestimmen, dass nur hermitesche Operatoren physikalische Observablen darstellen. In dem genannten Beispiel ist $(\hbar/2)(\hat{k}_x\hat{x} + \hat{x}\hat{k}_x)$ der einzig mögliche zugehörige hermitesche Operator.

Beispiele:

- Ort: Die Observable $\mathbf{r}$ wird durch den Operator $\hat{\mathbf{r}}$ dargestellt. ($\hat{\mathbf{r}}$: Multiplikation der Funktion $\psi(\mathbf{r})$ mit $\mathbf{r}$.)
- Impuls: Die Observable $\mathbf{p}$ wird durch den Operator $\hat{\mathbf{p}} = \hbar\,\hat{\mathbf{k}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ dargestellt.
- Drehimpuls: Die Observable $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ wird durch den Operator $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ dargestellt. Dies bedeutet
$$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad \text{usw.}$$
- Die Energie- oder Hamiltonfunktion $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = p^2/2m + V(\mathbf{r})$ wird durch den Operator
$$\begin{aligned}\hat{H}(\,\hat{\mathbf{r}}\,,\,\hat{\mathbf{p}}\,) &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\,\hat{\mathbf{r}}\,)\end{aligned}$$

dargestellt, wobei $V(\hat{\mathbf{r}})$ der Operator ist, der sich aus der Funktion $V(\mathbf{r})$ durch die Substitution $\mathbf{r} \to \hat{\mathbf{r}}$ ergibt.

5.3 Wahrscheinlichkeit eines Messergebnisses

1. *Postulat:* Mögliche Ergebnisse einer Messung von A: Spektrum von $\hat{A}$.

   Beispiele:

   - $\hat{\mathbf{r}}$: Spektrum ist $\mathbb{R}^3$
   - $\hat{\mathbf{p}}$: Spektrum ist $\mathbb{R}^3$
   - $\hat{l}_z$: Spektrum ist $m\hbar$ mit m ganzzahlig.
     Beweis: In Kugelkoordinaten $x = r \sin\theta \cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$, $z = r\cos\theta$ findet man, dass
     $$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi}\frac{\partial}{\partial z} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}.$$
     Hieraus, und aus
     $$\hat{l}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$
     folgt, dass
     $$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi}.$$
     Die Eigenwertgleichung fuer den Operator $\hat{l}_z$ in Kugelkoordinaten lautet dann
     $$\hat{l}_z\psi_\lambda(r,\theta,\phi) = -i\hbar\frac{\psi_\lambda(r,\theta,\phi)}{\partial\phi} = \lambda\psi_\lambda(r,\theta,\phi),$$
     wobei λ der Eigenwert ist. Die allgemeine Lösung der Eigenwertgleichung wird durch Funktionen der Form
     $$\psi_\lambda(r,\theta,\phi) = \tilde{\psi}_\lambda(r,\theta)\frac{e^{i\lambda\phi/\hbar}}{\sqrt{2\pi}}$$
     gegeben, wobei $\tilde{\psi}_\lambda(r,\theta)$ eine beliebige quadratintegrable und normierte Funktion der Variablen r und θ ist. Weil die Kugelkoordinaten (r,θ,ϕ) und $(r,\theta,\phi+2\pi)$ den gleichen Ort darstellen, muss die Funktion $\psi_\lambda(r,\theta,\phi)$ die Bedingung
     $$\psi_\lambda(r,\theta,\phi) = \psi_\lambda(r,\theta,\phi+2\pi)$$
     erfüllen. Hieraus folgt, dass $e^{i2\pi\lambda/\hbar} = 1$, so dass
     $$\lambda = m\hbar,$$
     mit m ganzzahlig.

2. *Postulat:* In der Quantenmechanik ist das Ergebnis einer Messung stochastisch. Das heisst, dass man das Ergebnis einer Messung nicht mit Sicherheit voraussagen kann. Die Theorie beschreibt nur die Wahrscheinlichkeit eines möglichen Messergebnisses. Es wird postuliert dass die Wahrscheinlichkeit $P(a)$, dass eine Messung der Observable A den Wert a gibt (falls a im diskreten Teil des Spektrums des Operators $\hat{A}$ liegt) bzw. die Wahrscheinlichkeit $p(a)da$, dass eine Messung der Observable A einen Wert im Intervall $[a, a+da]$ gibt (wenn a im kontinuierlichen Teil des Spektrums liegt) durch

$$\left.\begin{array}{c} P(a) \\ p(a) \end{array}\right\} = \frac{\langle\psi|\hat{P}_a|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\mathbb{S}_\lambda \left|\langle\psi|a\lambda\rangle\right|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

gegeben wird, wobei $\hat{P}_a$ die Projektion auf den Vektorraum $\mathcal{H}_a$ der Eigenkets zu dem Eigenwert a ist.

In den meisten Anwendungen werden wir den Zustand $|\psi\rangle$ so wählen, dass $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. (Der Zustand $|\psi\rangle$ ist "normiert".) In diesem Fall gilt dann

$$\left.\begin{array}{c} P(a) \\ p(a) \end{array}\right\} = \langle\psi|\hat{P}_a|\psi\rangle = \mathbb{S}_\lambda \left|\langle\psi|a\lambda\rangle\right|^2 .$$

Wichtiges Beispiel: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\mathbf{r})$ ein Teilchen am Ort $\mathbf{r}$ zu finden ist

$$p(\mathbf{r}) = \frac{|\psi(\mathbf{r})|^2}{\int d\mathbf{r}\, |\psi(\mathbf{r})|^2}.$$

Dies ergibt die "Statistische Interpretation der Quantenmechanik" und insbesondere der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$: $\psi(\mathbf{r})$ ist eine "Wahrscheinlichkeitsamplitude". Das Quadrat $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ist damit eine Wahrscheinlichkeitsdichte.

Erweiterungen:

- Erwartungswert:

$$\overline{a} = \left\{ \begin{array}{c} \int da p(a) a \\ \sum_a P(a) a \end{array} \right\} = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Beweis: Aus

$$|\psi\rangle = \mathbb{S}_{a,\lambda} |a\lambda\rangle\langle a\lambda|\psi\rangle$$

folgt, dass

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi\rangle &= \mathbb{S}_{a,\lambda}\hat{A}|a\lambda\rangle\langle a\lambda|\psi\rangle \\ &= \mathbb{S}_{a,\lambda}a|a\lambda\rangle\langle a\lambda|\psi\rangle.\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich, dass

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \mathbb{S}_{a,\lambda}a\langle\psi|a\lambda\rangle\langle a\lambda|\psi\rangle \\ &= \mathbb{S}_{a,\lambda}a|\langle\psi|a\lambda\rangle|^2.\end{aligned}$$

- Abweichung oder Streuung:

$$(\Delta a)^2 = \overline{(a-\overline{a})^2} = \overline{a^2} - (\overline{a})^2 .$$

- Das Ergebnis einer Messung der Observablen A ist deterministisch ("scharf", ohne Streuung) nur wenn $|\psi\rangle$ ein Eigenket des Operators $\hat{A}$ ist. $\Rightarrow$ Nur bei diskreten Spektren kann eine Messung vollkommen genau sein. (Eigenfunktionen bei kontinuierlichen Spektren sind nicht quadratintegrabel!)

  Beispiel: Es gibt Zustände mit l_z scharf, aber nicht mit $\mathbf{p}$ oder $\mathbf{r}$ scharf. (Aber es gibt Zustände mit Δp oder Δx beliebig klein.)

  $\Rightarrow$ Wenn zwei Observable A, B nicht vertauschbar sind, können A, B nicht gleichzeitig scharf sein, denn es gibt keine gemeinsamen Eigenfunktionen, wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Diese Beobachtung wird durch die Heisenbergsche Unschärferelation präzisiert:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|[A, B]\right| .$$

  Diese Relation wird hier nicht bewiesen.

  Beispiel: $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

  Wenn Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ vertauschbar sind (d.h. $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$), dann nennt man die Observablen A und B <u>kommensurabel</u>. Wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ nennt man A und B <u>inkommensurabel</u>.