Skript zur 6. Vorlesung "Quantenmechanik", Freitag den 6. Mai, 2011.

5.4 Irreversibilität einer Messung

Postulat: Eine Messung führt zu einer <u>irreversiblen</u> Änderung des Zustandes $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle \to \hat{P}_a|\psi\rangle,$$

Wenn man mit normierten Zuständen arbeitet, muss man ggf. den Zustand $\hat{P}_a|\psi\rangle$ neu normieren. Diese Änderung des Quantenmechanischen Zustandes durch eine Messung wird "Kollaps der Wellenfunktion" genannt.

5.5 Schrödinger-Gleichung

Postulat: Die "Bewegungsgleichung" des Zustandes $|\psi\rangle$ wird durch die Schrödinger-Gleichung gegeben. Diese lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\mathbf{r},t\right) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t),$$

wobei $\hat{H}$ der Hamilton Operator ist.
In der Dirac-Notation sieht die Schrödinger-Gleichung so aus:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle \quad \text{(ket)}, \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| &= \langle\psi|\hat{H} \quad \text{(bra)}. \end{aligned}$$

Beispiel: Für ein Teilchen im Potentialfeld gilt $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})$, so dass

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\mathbf{r},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t).$$

Erweiterungen:

1. Skalarprodukte sind zeitunabhängig: $\frac{d}{dt}\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$

   Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\psi_1|\psi_2\rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_1|\right)|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi_2\rangle\right) \\ &= \frac{i}{\hbar}\left(\langle\psi_1\hat{H}|\right)|\psi_2\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi_1|\left(\hat{H}|\psi_2\rangle\right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

2. Formale Lösung der Schrödinger-Gleichung $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$, wobei $\hat{U}$ ein durch die Schrödinger-Gleichung bestimmter Operator ist, der Evolutionsoperator genannt wird. Der Evolutionsoperator $\hat{U}$ ist unitär, weil Skalarprodukte zeitunabhängig sind.

   Wenn $\hat{H}$ zeitunabhängig ist, gilt

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}.$$

   Beweis: Wir setzen $t_0 = 0$ und beweisen, dass $|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi(0)\rangle$ mit $U(t,0) = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}$ und beliebigem $|\psi(0)\rangle$ der Schrödinger-Gleichung genügt.

   Der Exponent eines Operators wird als

$$e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-it/\hbar)^n \hat{H}^n$$

   berechnet. Hieraus folgt, dass

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}U(t,0) &= i\hbar\frac{d}{dt}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \\
&= i\hbar\frac{d}{dt}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-it/\hbar)^n \hat{H}^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{n}{n!}(-it/\hbar)^{n-1}\hat{H}^n.
\end{aligned}$$

   Nun bemerken wir, dass der Term mit $n = 0$ nicht zur Summe beiträgt. Deshalb kann die Summation bei $n = 1$ beginnen:

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}U(t,0) &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{n!}(-it/\hbar)^{n-1}\hat{H}^n \\
&= \hat{H}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-it/\hbar)^{n-1}\hat{H}^{n-1} \\
&= \hat{H}\sum_{n'=0}^{\infty}\frac{1}{n'!}(-it/\hbar)^{n'}\hat{H}^{n'} \\
&= \hat{H}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}.
\end{aligned}$$

Einsetzen von $|\psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$ in die Schrödinger-Gleichung gibt dann

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\psi(0)\rangle \\ &= \hat{H}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\psi(0)\rangle \\ &= \hat{H}|\psi(t)\rangle. \end{aligned}$$

3. Für die Zeitabhängigkeit eines Erwartungswertes findet man:

$$\frac{d}{dt}\overline{a} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\hat{H},\hat{A}]|\psi\rangle.$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\overline{a} &= \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle\right) \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{A}|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H}|\psi\rangle. \end{aligned}$$

4. Eine Observable $\hat{A}$ wird <u>erhalten</u> genannt, wenn $P(a)$ zeitunabhängig ist für beliebige Zustände $|\psi\rangle$. Eine Observable A ist erhalten dann, und nur dann, wenn

$$\left[\hat{H},\hat{A}\right] = 0.$$

Beweis: $P(a)$ zeitunabhängig für alle $|\psi\rangle \Rightarrow$ der Erwartungwert $\overline{a}$ ist zeitunabhängig für alle $|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|[\hat{H},\hat{A}]|\psi\rangle = 0$ für alle $|\psi\rangle \Rightarrow [\hat{H},\hat{A}] = 0$.

Umgekehrt, wenn $[\hat{H},\hat{A}] = 0$, dann auch $[\hat{H},\hat{A}^n] = 0$ für beliebige n. Dann $\frac{d}{dt}\overline{a^n} = 0$ für alle n. Da die Momente $\overline{a^n}$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung festlegen, folgt, dass $P(a)$ zeitunabhängig ist.

5. Ein Zustand $|\psi\rangle$ heißt <u>stationär</u>, wenn die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer beliebigen Observablen A in diesem Zustand zeitunabhängig ist. Da die Wahrscheinlichkeitsverteilungen aller Observablen den physikalischen Zustand bestimmen, stellen $|\psi(t)\rangle$ und $|\psi(0)\rangle$ den gleichen Zustand dar. Hieraus folgt, dass $|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)}|\psi(0)\rangle$ mit einer beliebigen Phase $\alpha(t)$.

Es gilt nun: $|\psi\rangle$ ist ein stationärer Zustand $\Leftrightarrow$ $|\psi\rangle$ ist Eigenzustand des Hamiltonoperators $\hat{H}$.

Beweis: Wenn $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, dann $|\psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)Et}|\psi(0)\rangle$. Umgekehrt, wenn $|\psi\rangle$ nicht $\hat{H}$-Eigenket, dann gibt es E_1, E_2, sodass $\langle E_1|\psi\rangle \neq 0$ und $\langle E_2|\psi\rangle \neq 0$. Dann $\langle E_j|\psi(t)\rangle = \langle E_j|e^{-(i/\hbar)E_j t}|\psi(0)\rangle = e^{-(i/\hbar)E_j t}\langle E_j|\psi(0)\rangle$, $j = 1, 2$. Andererseits, aus $|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)}|\psi(0)\rangle$ folgt, dass $\langle E_j|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)}\langle E_j|\psi(0)\rangle$, mit dem gleichen Phasenfaktor für $j = 1, 2$. Da $E_1 \neq E_2$ gibt dies einen Widerspruch.

Wenn $\hat{H}$ ein kontinuierliches Spektrum hat, gibt es keine normierten stationären Zustände.

Wenn $\hat{H}$ ein diskretes Spektrum hat, gibt es normierte stationäre Zustände.

6 Beispiele in einer Dimension

6.1 Freies Teilchen

Freies Teilchen:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Aus $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$ folgt, dass es eine Basis von $\hat{H}$-Eigenzuständen gibt, die zur gleichen Zeit auch $\hat{p}$-Eigenzustände sind. Anders gesagt: Stationäre Zustände können als $\hat{p}$-Eigenzustände gewählt werden. Die Eigenzustände $|p\rangle$ des Operators $\hat{p} = \hbar\hat{k}$ sind bekannt: Sie haben Wellenfunktion

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}.$$

Normierung:

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'),$$

Vollständigkeit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle\langle p| = \hat{1},$$

Zugehöriger $\hat{H}$-Eigenwert:

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}.$$

Jeder $\hat{H}$-Eigenwert (ausser $E = 0$) ist zweifach entartet:

$$E(p) = E(-p).$$

Bemerkungen:

- Als $\hat{H}$-Eigenzustände kann man auch lineare Kombinationen von $\psi_p(x)$ und $\psi_{-p}(x)$ nehmen, z.B.

$$\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \cos\frac{px}{\hbar} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \sin\frac{px}{\hbar}.$$

- Statt $\psi_p(x)$ verwendet man auch oft die Funktionen

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx},$$

mit $p = \hbar k$, $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Normierung:

$$\langle k|k'\rangle = \delta(k - k').$$

Vollständigkeit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle\langle k| = \hat{1}.$$