

2. Formalismus der Quantenmechanik

2.1 Messungen

Die Beschreibung des Messprozesses ist in der Quantenmechanik fundamental anders als in der klassischen Physik. Klassisch soll ein idealer Messprozess das zu vermessende System überhaupt nicht beeinflussen (z.B. soll eine Geschwindigkeitsmessung an einem Partikelchen dieses nicht abbremsen; eine Probeladung q , die ein elektrisches Kraftfeld vermessen soll, wird im Limes $q \rightarrow 0$ betrachtet, um Einflüsse des eigenen Feldes auszuschalten).

Anders in der Quantenmechanik: hier wird nicht nur der Einfluss der Messapparatur auf das zu vermessende System (quasi als notwendiges Übel) mitberücksichtigt, sondern der Messprozess wird sogar definiert über den Einfluss

des Messapparatur auf den Zustand eines Systems.

Sei $|\gamma\rangle$ der Zustand eines Systems und A ein Operator, der eine Observable bzw eine Messapparatur symbolisiert. Sei $A=A^\dagger$, so dass die Eigenkets $|a'\rangle$ von A eine orthonormierte Basis bilden. In dieser Basis gilt:

$$|\gamma\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\gamma\rangle \quad (2.1)$$

Eine Messung bedeutet nun (bzw. definiert sich dadurch), dass die Messapparatur einen Einfluss auf den Zustand des Systems nimmt und $|\gamma\rangle$ in einen Eigenzustand umwandelt:

$$|\gamma\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |a'\rangle. \quad (2.2)$$

Im SGz-Experiment wird ein Atom, das sich zunächst in einem allgemeinen Zustand

$$|\gamma\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle, \quad |\pm\rangle = |S_z; \pm\rangle \quad (2.3)$$

befindet, entweder nach oben oder nach unten abgelenkt, d.h. entweder $|y\rangle \xrightarrow{SGz} |+\rangle$ oder $|y\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |-\rangle$, wie es die Messung am Detektor nachweist.

Eine Messung ändert also den Zustand eines Systems, es sei denn, das System ist bereits in einem Eigenzustand:

$$\text{falls } |y\rangle \equiv |a'\rangle \Rightarrow |a'\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |a'\rangle \quad (2.4)$$

(vgl. zwei sequentielle SGz-Apparate).

Für einen gegebenen allgemeinen Zustand $|y\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$ macht die Quantenmechanik a priori keine Aussage, welcher genaue Eigenzustand nach der Messung angenommen wird. Die Quantenmechanik beruht lediglich auf dem Postulat, dass die Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|a'\rangle$ zu messen gegeben ist durch

$$\text{Wahrscheinlichkeit für } a': = |\langle a' | y \rangle|^2, \quad (2.5)$$

wobei vorausgesetzt ist, dass $|\chi\rangle$ normiert ist, $\|\chi\| = 1$. (Born'sche Regel)

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik bedeutet streng genommen, dass für den tatsächlichen Ausgang einer einzelnen Messung keine echte Vorhersage gemacht werden kann (ob ein bestimmtes einzelnes Atom im SG-Experiment nach oben oder unten abgelenkt wird, kann nicht i.A. vorhergesagt werden).

Die Quantenmechanik entfaltet daher ihre Vorhersagekraft erst, wenn eine große Zahl von Messungen an einem Ensemble von identisch präparierten Systemen ("reines Ensemble") durchgeführt wird.

Für die Wahrscheinlichkeitsinterpretation war das Postulat (1.11) (2), $\langle \chi | \chi \rangle \geq 0$ von fundamentaler Bedeutung.

Wir definieren nun den Erwartungswert eines Operators A bezüglich des Zustands $|\gamma\rangle$:

$$\langle A \rangle_\gamma = \langle \gamma | A | \gamma \rangle. \quad (2.6)$$

Der Erwartungswert hängt offensichtlich von Zustand $|\gamma\rangle$ ab. Wenn es keine Verwechslung geben kann, schreiben wir auch kurz $\langle A \rangle \equiv \langle A \rangle_\gamma$.

Der Erwartungswert ist der mittlere gemessene Wert, denn

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{a' a''} \langle \gamma | a' \rangle \underbrace{\langle a' | A | a'' \rangle}_{a'' \delta_{a' a''}} \langle a'' | \gamma \rangle \\ &= \sum_{a'} a' |\langle a' | \gamma \rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

$a' \uparrow$
 \uparrow

Messwerte
Wahrscheinlichkeit a' zu messen

Es ist wichtig, die Begriffe Eigenwert, Erwartungswert und wahrscheinlichster Wert auseinander zu halten. Als Analogon betrachte man einen Würfel: die Augenzahlen 1, 2, 3, 4, 5, 6 entsprechen den Eigenwerten. Da jede mit der Wahrscheinlich-

keit $\frac{1}{6}$ gewürfelt werden kann, ist der Erwartungswert $= \sum_{i=1}^6 i \cdot \frac{1}{6} = 3,5$. Man könnte jedoch schlecht behaupten, 3,5 sei der wahrscheinlichste Wert...

2.2 Kompatible Observable

Zwei Observable sind miteinander kompatibel, wenn die zugehörigen Operatoren A und B miteinander vertauschen

$$AB - BA =: [A, B] = 0, \quad (28)$$

andernfalls, wenn $[A, B] \neq 0$, sind sie inkompatibel.

Sind Observable kompatibel, so sind ihre Eigenkets miteinander verknüpft, wie das folgende wichtige Theorem besagt:

Seien A und B kompatible Observable und seien die Eigenwerte von A nicht entartet,

dann sind die Matrixelemente $\langle a'' | B | a' \rangle$
alle diagonal.

Beweis (einschließlich Klärung aller Begriffe):

Es gilt:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a'' | [A, B] | a' \rangle = \langle a'' | (AB - BA) | a' \rangle \\ &= (a'' - a') \langle a'' | B | a' \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

Die Eigenwerte sind nicht entartet bedeutet, dass
keine zwei Eigenwerte gleich sind, $a'' \neq a'$

$$\Rightarrow \langle a'' | B | a' \rangle = 0 \quad \text{für } a'' \neq a'$$

$$\text{d.h.} \quad \langle a'' | B | a' \rangle = \sum_{a'} \delta_{a'' a'} \langle a' | B | a' \rangle \quad (2.10)$$

Bezüglich der Basis der $|a'\rangle$ Ketts ist die
Matrixdarstellung von B also diagonal.

Also können A und B bezüglich der gleichen
Ket-Basis als diagonale Matrizen dargestellt werden.

Es folgt

$$\begin{aligned} \Rightarrow B|a'\rangle &= \sum_{a''} |a''\rangle \underbrace{\langle a''|B|a'\rangle}_{=\sum_{a''} \langle a''|B|a''\rangle \delta_{a''a'}} \underbrace{\langle a''|a'\rangle}_{\delta_{a''a'}} \\ &= \langle a'|B|a'\rangle |a'\rangle, \end{aligned} \quad (2.11)$$

d.h. die Eigenwerte von B sind gegeben durch

$$b' = \langle a'|B|a'\rangle \quad (2.12)$$

wod $|a'\rangle$ ist daher simultaner Eigenket von A und B .

Falls im Eigenwertspektrum von A ein Eigenwert n -fach entartet ist (d.h. n Eigenwerte gleich sind), dann gibt es n verschiedene Eigenkets mit

$$A|a^{(i)}\rangle = a'|a^{(i)}\rangle, \quad i=1, \dots, n \quad (2.13)$$

Jede Linearkombination der $|a^{(i)}\rangle$ ist damit auch ein Eigenvektor. Wir können nun genau die Linearkombination auswählen, die B diagonalisiert, so dass ein Satz simultaner Eigenkets auch bei

Entartung existiert.

Beispiel: Stern-Geleit System

Wie in den Übungen diskutiert wird, können die Drehimpulsoperatoren bezüglich der S_z -Basis $| \pm \rangle \equiv | S_z; \pm \rangle$ dargestellt

werden. Das Ergebnis ist

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \quad \hat{=} \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_3$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \quad \hat{=} \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_1$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} (-i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|) \quad \hat{=} \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_2$$

(2.14)

Wie sich direkt nachrechnen lässt, gilt:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k, \quad i, j, k = x, y, z \quad (2.15)$$

$$\left(\text{Für den Antikommutator } \{S_i, S_j\} \equiv S_i S_j + S_j S_i = \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij} \right) \quad (2.16)$$

(2.15) besagt offensichtlich, dass z.B.

S_x und S_z nicht vertauschen

In der Tat ist ein Eigenvektor von S_z , z.B. $|+\rangle$,
kein Eigenvektor von S_x :

$$S_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |-\rangle. \quad (2.17)$$

Alle S_i sind also zueinander inkompatibel.

Aus (2.16) lesen wir ab, dass

$$\left\{ \begin{array}{c} S_i \\ \uparrow \\ \text{wäre Summe} \end{array}, S_i \right\} = 2 S_i S_i = 2 S_i^2 = \frac{1}{2} \hbar^2, \quad (2.18)$$

also proportional zur Identität ist.

$$\Rightarrow \vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (2.19)$$

Daher vertauscht das Drehimpulsquadrat mit
jeder Komponente

$$[\vec{S}^2, S_i] = 0 \quad (2.20)$$

und es lässt sich jeweils eine simultane Ket-
Basis angeben.

Wenn zwei Observable kompatibel sind hat das eine wichtige Konsequenz für Messungen; führen wir z.B. drei Messungen durch, 1) A 2) B und 3) wieder A. Ein beliebiger Anfangszustand

$|j\rangle$ wird also dadurch:

$$|j\rangle \xrightarrow{A} |a'\rangle \xrightarrow{B} |a'\rangle \xrightarrow{A} |a'\rangle \quad (221)$$

Der zweite Schritt gilt nur, weil $|a'\rangle$ auch simultaner Eigenket von B ist. Die 3. Messung mit A liefert somit wieder mit Wahrscheinlichkeit 1 das gleiche Ergebnis wie die 1. Messung mit A.

2.3 Inkompatible Observable

Inkompatible Observable A und B mit $[A, B] \neq 0$ haben keine gemeinsame vollständige Basis von simultanen Eigenkets. Um dies zu zeigen nehmen wir das Gegenteil an:

Sei $[A, B] \neq 0$ und $|a'\rangle$ Eigenwertbasis von A und B , dann gilt

$$AB|a'\rangle = A b'|a'\rangle = a' b'|a'\rangle$$

$$\text{und } BA|a'\rangle = B a'|a'\rangle = a' b'|a'\rangle,$$

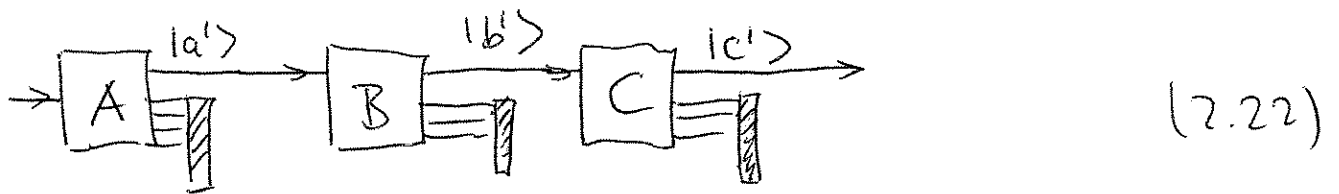
und damit $[AB - BA]|a'\rangle = 0$, was im Widerspruch zu $[A, B] \neq 0$ und der Vollständigkeit von $|a'\rangle$ ist.

Inkompatible Observable können also, wenn überhaupt, lediglich auf einem Unterraum eine simultane Basis haben.

Die Besonderheiten von inkompatiblen Observablen wird an folgendem Beispiel besonders deutlich:

Seien A, B und C jeweils inkompatible Observable, die an einem Zustand Messungen durchführen (man darf, muss aber nicht, an ein Stern-Gerlach-Apparat in jeweils verschiedenen Ausrichtungen denken).

Jede Messung projiziert den Zustand (z.B. einen Atomstrahl) auf einen jeweiligen Eigenket:



Jeweils ein projizierter Zustand wird behalten, die übrigen möglichen Messergebnisse werden aussortiert.

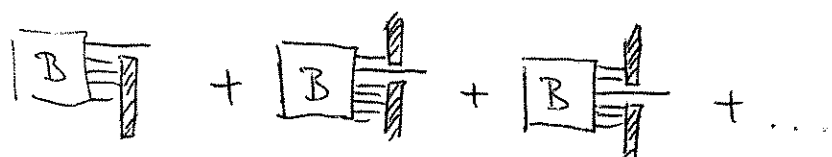
Sei der projizierte Zustand $|a'\rangle$ nach Messung A auf 1 normiert, $\|a'\| = 1$. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, bei B einen bestimmten Zustand $|b'\rangle$ zu messen $= |\langle b'|a'\rangle|^2$. (7.23)

Die Wahrscheinlichkeit, anschließend bei C einen bestimmten Zustand $|c'\rangle$ zu messen, ist dann

$$= |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2, \quad (2.24)$$

da Wahrscheinlichkeiten multiplikativ sind.

Nun betrachten wir die Gesamtwahrscheinlichkeit $|c'\rangle$ zu messen, während wir alle möglichen Wege über den Zustand $|b'\rangle$ zulassen. Dafür summieren wir über die b' Zwischenzustände:



$$|B\rangle + |B\rangle + |B\rangle + \dots \quad (2.25)$$

Das Ergebnis ist

$$\sum_{b'} |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b'\rangle \langle b'|c'\rangle. \quad (2.26)$$

Dies vergleichen wir mit einer Messung, bei der die B-Apparatur entfernt wurde:



$$|A\rangle |C\rangle \quad (2.27)$$

Da B dennoch eine vollständige Basis definiert (Vermöge seiner Eigenkets), können wir $|a'\rangle$ durch

$$B \text{ aufspannen: } |a'\rangle = \mathbb{1} |a'\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'|a'\rangle. \quad (7.28)$$

Die Wahrscheinlichkeit, $|c'\rangle$ zu beobachten, ist

$$\begin{aligned} |\langle c'|a'\rangle|^2 &= \left| \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \right|^2 \\ &= \sum_{b', b''} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b''\rangle \langle b''|c'\rangle \end{aligned} \quad (7.29)$$

Offensichtlich sind (7.26) und (7.29) nicht gleich. Die Messung von C hängt davon ab, ob wir die B -Messung tatsächlich durchgeführt haben.

In (7.26) prüfen wir tatsächlich nach, welchen b' Weg das System gegangen ist. Diese Messung beeinflusst damit den Zustand.

In (7.27) erhalten wir keine Information über den b' Weg. Das System kann also sowohl über b' als auch über b'' (als auch über

bei der Wege zugleich) gegangen sein. (Dieses Gedankenexperiment ist eine Verallgemeinerung des Doppelspaltexperiments.)

(2.26) und (2.29) werden in der Tat gleich,

wenn

$$[A, B] = 0 \quad \text{oder} \quad [B, C] = 0.$$

Z.B. für $[A, B] = 0$ ist dann ein $|b'\rangle$ kollinear zu $|a'\rangle$, und alle anderen $|b'\rangle$ Eigenkets orthogonal zu $|a'\rangle$. D.h. nur jeweils ein Term aus der Summe in (2.26) bzw. der Doppelsumme in (2.29) ist nichtverschwindend und (2.26) und (2.29) sind gleich (ähnlich für $[B, C] = 0$).

2.5 Die allgemeine Unschärferelation

Die Inkompatibilität von Observablen hat eine direkte Konsequenz für die Menge und Qualität von Informationen, die wir über ein System durch Messung erhalten können, d.h. "wie genau" wir messen können.

Betrachten wir dazu den folgenden Operator zu einer Observablen A :

$$\Delta A = A - \langle A \rangle, \quad (2.30)$$

wobei der Erwartungswert bezüglich eines bestimmten physikalischen Zustands $|\psi\rangle$ genommen wird.

Die Mittlere Quadratische Abweichung oder Varianz von A ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle (\Delta A)^2 \rangle &= \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Falls $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand von A ist, verschwindet die Varianz von A exakt.

Die Varianz kann als "Unschärfe" einer Observablen bezüglich eines Zustandes betrachtet werden.

Sei z.B. $|y\rangle = |+\rangle \equiv |S_z; +\rangle$ eines Spin- $\frac{1}{2}$ Systems.

Dann liefert eine S_z -Apparatur immer den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$. Die Varianz von S_z ist

$$\begin{aligned} \langle (\Delta S_z)^2 \rangle &= \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 \\ &= \langle + | S_z^2 | + \rangle - \langle + | S_z | + \rangle^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \\ &= 0. \end{aligned} \tag{2.32}$$

$S_z = +\frac{\hbar}{2}$ wird also "scharf gemessen". Hingegen liefert eine S_x -Messung eines anfänglichen $|+\rangle$ Zustands jeweils hälftig die Messwerte $S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Die Varianz ist $(S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|))$

$$\begin{aligned} \langle (\Delta S_x)^2 \rangle &= \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 \\ &= \langle + | S_x^2 | + \rangle - \langle + | S_x | + \rangle^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\langle + | (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) | + \rangle \right. \\ &\quad \left. - \left(\langle + | (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) | + \rangle \right)^2 \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle (\Delta S_x)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \langle +1+ \rangle & \langle -1- \rangle & \langle +1+ \rangle \\ - & 0 & \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.33)$$

Die Observable S_x wird also "unscharf" gemessen. An dieser Stelle lässt sich bereits vermuten, dass die Unscharfe von S_x bezüglich der S_z -Basis von der Inkompatibilität von S_x und S_z kommt. In der Tat gilt für zwei Observable A und B bezüglich jeden beliebigen Zustands folgende allgemeine Unscharferelation:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2, \quad (2.34)$$

für $A=A^\dagger, B=B^\dagger$.

Was im Folgenden bewiesen werden soll:

Das Postulat gilt $\langle y|y \rangle \geq 0$.

Für jedes $\lambda \in \mathbb{C}$ gilt mit $|y\rangle = |\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle$ daher

$$\left(\langle \alpha| + \lambda^* \langle \beta| \right) \left(|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle \right) \geq 0. \quad (2.35)$$

Wählen wir $\lambda = -\frac{\langle \beta|\alpha \rangle}{\langle \beta|\beta \rangle}$, so folgt

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \alpha|\alpha \rangle + \lambda^* \lambda \langle \beta|\beta \rangle + \left[\lambda^* \langle \beta|\alpha \rangle + \lambda \langle \alpha|\beta \rangle \right] \\ &= \langle \alpha|\alpha \rangle + \frac{1}{\langle \beta|\beta \rangle} |\langle \beta|\alpha \rangle|^2 - 2 \frac{1}{\langle \beta|\beta \rangle} |\langle \beta|\alpha \rangle|^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle \alpha|\alpha \rangle \langle \beta|\beta \rangle - |\langle \alpha|\beta \rangle|^2}_{\geq 0} \geq 0 \quad (2.36)$$

Dies ist die Schwarz'sche Ungleichung (vgl. $|\vec{a}|^2 |\vec{b}|^2 \geq |\vec{a} \cdot \vec{b}|^2$). Diese verwenden wir für die Zustände

$$|\alpha\rangle = \Delta A | \rangle \quad \text{und} \quad |\beta\rangle = \Delta B | \rangle, \quad (2.37)$$

wobei $| \rangle$ irgendein beliebiger Zustand sein kann:

$$\langle \alpha|\alpha \rangle = \langle (\Delta A)^2 \rangle$$

$$\langle \beta|\beta \rangle = \langle (\Delta B)^2 \rangle$$

$$\langle \alpha|\beta \rangle = \langle \Delta A \Delta B \rangle$$

$$\stackrel{(2.36)}{\Rightarrow} \langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \quad (2.38)$$

Mit Hilfe von Kommutator und Antikommutator gilt

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\} \quad (2.39)$$

wobei

$$[\Delta A, \Delta B] = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] = [A, B] \quad (2.40)$$

weil die Zahlen $\langle A \rangle$ und $\langle B \rangle$ mit einander und mit Operatoren vertauschen.

Der Kommutator ist anti-hermitisch,

$$\begin{aligned} ([A, B])^\dagger &= (AB)^\dagger - (BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger \\ &= BA - AB = [B, A] = -[A, B], \end{aligned} \quad (2.41)$$

während der Antikommutator hermitisch ist,

$$(\{\Delta A, \Delta B\})^\dagger \equiv \{\Delta A, \Delta B\}. \quad (2.42)$$

Weil hermitesche Operatoren reelle Eigenwerte haben, können ihre Erwartungswerte auch nur reell sein.

Ähnlich sind die Erwartungswerte von anti-hermiteschen Operatoren immer rein imaginär, d.h.

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle \stackrel{(2.39)}{=} \underbrace{\frac{1}{2} \langle [\bar{A}, B] \rangle}_{\text{rein imaginär}} + \frac{1}{2} \langle \underbrace{\{\Delta A, \Delta B\}}_{\text{rein reell}} \rangle \quad (2.43)$$

Daher gilt:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \stackrel{(2.38)}{\geq} \frac{1}{4} |\langle [\bar{A}, B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2 \quad (2.44)$$

womit die Unschärferelation (2.34) bewiesen ist, denn die Fortlassung des letzten Terms kann die Ungleichung nur stärken machen.

(NB: Wir werden später sehen, dass die berühmte Orts-, Impuls-Unschärferelation ein einfacher Spezialfall von (2.44) ist. Zwischen Orts- und Impulsoperator besteht der Zusammenhang

$$[x, p] = i\hbar, \text{ so dass } \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

folgt.)

2.6 Basiswechsel - Unitäre Transformationen

Gegeben zwei inkompatible Observable A und B , die durch hermitesche Operatoren symbolisiert wurden, so gibt es zwei Sätze von Eigenkets $\{|a'\rangle\}$ und $\{|b'\rangle\}$, welche als Basisvektoren den Zustandsraum aufspannen können. So können wir im SG-Experiment die Zustände in der $|S_z; \pm\rangle$ -Basis aufspannen, wir könnten alternativ aber genauso die $|S_x; \pm\rangle$ -Basis verwenden. Da beide Basen den gleichen Zustandsraum aufspannen, muss es eine Transformation geben, die die eine Basis in die andere überführt. Der zugehörige Transformationsoperator kann direkt aus den beiden Basen konstruiert werden:

Gegeben zwei Sätze von Basisvektoren $\{|a'\rangle\}$ und $\{|b'\rangle\}$, so existiert ein unitärer Operator U , so dass

$$|b^{(1)}\rangle = U |a^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle = U |a^{(2)}\rangle, \dots \quad (2-45)$$

Hierbei haben wir die Eigenwerte und -vektoren geordnet und nummeriert. Der Operator ist unitär, weil er die Bedingungen

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad U U^\dagger = \mathbb{1} \quad (2.46)$$

erfüllt.

Der Operator U kann explizit konstruiert werden:

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| \quad (2.47)$$

denn

$$U |a^{(k)}\rangle = \sum_k |b^{(k)}\rangle \underbrace{\langle a^{(k)} | a^{(k)} \rangle}_{= \delta_{kk}} = |b^{(k)}\rangle, \quad (2.48)$$

wegen der Orthonormalität der Basisvektoren.

Ebenso lässt sich die Unitarität von U zeigen:

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \sum_{\ell k} |a^{(\ell)}\rangle \underbrace{\langle b^{(\ell)} | b^{(k)} \rangle}_{= \delta_{\ell k}} \langle a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| \\ &= \mathbb{1}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

ähnlich $U U^\dagger = \mathbb{1}$.

Die Matrixdarstellung von U z.B. bezüglich der $\{|a'\rangle\}$ -Basis lautet

$$U_{kl} = \langle a^{(k)} | \underbrace{U | a^{(l)} \rangle}_{|b^{(k)}\rangle} = \langle a^{(k)} | b^{(k)} \rangle, \quad (2.50)$$

d.h. die Matrixelemente von U in der $\{|a'\rangle\}$ -Basis sehen sich aus den inneren Produkten der alten und der neuen Basis-Vektoren zusammen.

Aus der Transformation der Basis-Vektoren folgt sofort die Transformation der Koordinaten eines beliebigen Vektors $|y\rangle$ bezügl. des Koordinatensystems, d.h. der jeweiligen Basis (der Vektor selbst ist natürlich unabhängig von der Basis):

$$|y\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|y\rangle = \sum_l |a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|y\rangle \quad (2.51)$$

Hierbei sind $\langle a^{(l)}|y\rangle$ die Koordinaten bezüglich der $\{|a'\rangle\}$ -Basis. Die Koordinaten bezügl. der

$\{|b'\rangle\}$ -Basis sind

$$\begin{aligned}
 \langle b^{(k)} | y \rangle &= \sum_l \langle b^{(k)} | a^{(l)} \rangle \langle a^{(l)} | y \rangle \\
 &= \sum_l \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(l)} \rangle \langle a^{(l)} | y \rangle, \quad (2.52)
 \end{aligned}$$

oder in Matrixschreibweise

$$y_k = U_{ke}^\dagger y_e. \quad (2.53)$$

Dies lässt sich auf Transformationen der Matrixdarstellung von Operatoren ausdehnen:

$$\begin{aligned}
 X'_{ke} &= \langle b^{(k)} | X | b^{(e)} \rangle = \sum_{mn} \langle b^{(k)} | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | b^{(e)} \rangle \\
 &= \sum_{mn} \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | U | a^{(e)} \rangle \\
 &= U_{km}^\dagger X_{mn} U_{ne}. \quad (2.54)
 \end{aligned}$$

Dies entspricht der bekannten Formel für Ähnlichkeitstransformationen in der Matrix-Algebra

$$X' = U^\dagger X U, \quad (2.55)$$

wobei der Strich die Koordinaten in $\{|b'\rangle\}$ -Basis symbolisiert.

2.7 Kontinuierliche Spektren

Bislang haben wir den ganzen Formalismus anhand des Stern-Gerlach-Experiments, d.h. eines 2-Zustandssystems entwickelt, bei dem Operatoren 2 Eigenwerte hatten.

In der Quantenmechanik wollen wir aber auch Positionen, Impulse, etc. von Teilchen beschreiben, also Größen, die Werte aus ganz \mathbb{R} annehmen können. Betrachten wir z.B. ein Teilchen, das sich entlang einer Achse x bewegen kann.

Quantenmechanisch soll also jeder möglichen Position x ein eigener Zustands-Vektor entsprechen. Da die Zahl der möglichen Zustände über Dimensionalität des Vektorraumes entspricht, müssen wir nun überabzählbar unendlich dimensionale Vektorräume betrachten.

Die zugehörige Mathematik rigoros abzuhandeln geht über den Rahmen des Vorleses hinaus. Für das Verständnis der physikalischen Strukturen ist dies allerdings auch nicht notwendig. Wir werden daher weitestgehend den notwendigen Formalismus aus dem bisher eingeführten motivieren. Falls diese naive Verallgemeinerungen an ihre Grenzen stoßen, wird ein genaueres Blick in die Mathematik folgen.

Diskretisieren wir im Gedanken also die reelle Achse in diskrete Gitterpunkte mit Abstand a



Wir stellen uns vor, das quantenmechanische Teilchen kann jeweils nur auf den Gitterpunkten sitzen. Der Zustandsraum wird also

aufgespannt durch die Positionsvektoren

$$|i\rangle, \text{ mit z.B. } i \in \mathbb{Z} \quad (2.56)$$

Eine Ortsmessung, der ein Ortsoperator X zugeordnet wird, liefert dann die möglichen Koordinaten als Eigenwerte:

$$X |i\rangle = x'_i |i\rangle \quad \text{mit} \quad x'_i = a \cdot i \quad (2.57)$$

Da $x'_i \in \mathbb{R}$ soll X ein hermitescher Operator auf dem Zustandsraum sein. Die Orthogonalität und Vollständigkeit der Basis wird nun ausgedrückt durch

$$\begin{aligned} \langle i | j \rangle &= \delta_{ij} \\ \mathbb{1} &= \sum_i |i\rangle \langle i|. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Ein beliebiger Zustand $|y\rangle$ lautet in dieser Basis

$$|y\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | y \rangle \quad (2.59)$$

Nun möchten wir einen Kontinuumslimit erreichen, indem der Gitterabstand verschwindet, $a \rightarrow 0$. Die Zahl der Gitterpunkte pro physikalischer Längeneinheit L geht dann in gleicher Weise gegen unendlich, $N_L \approx \frac{L}{a} \rightarrow \infty$.

Das gleiche gilt für die Zahl der Zustände (pro Längeneinheit). Wichtig ist, dabei die Orthonormalität und Vollständigkeit der Basis (2.58) beizubehalten.

In diesem Kontinuumslimit wird die Summe über die Gitterpunkte als Riemann-Summe zum Integral. Das Integralmaß ist dabei durch den Gitterabstand vorgegeben $\Delta x' = a \rightarrow dx'$:

$$\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle \langle i| = \sum_i \Delta x \frac{1}{a} |i\rangle \langle i|$$

$$=: \sum_i \Delta x' |x'_i\rangle \langle x'_i| \quad \text{mit } |x'_i\rangle := \frac{1}{\sqrt{a}} |i\rangle \quad (2.60)$$

Kontinuumslimit.

$$\underline{\underline{\mathbb{1} = \int dx' |x'\rangle \langle x'|}} \quad (\text{Vollständigkeit}) \quad (2.61)$$

Die im (2.60) eingeführten Zustände $|x'_i\rangle$ sind nun nicht mehr auf 1 normiert, sondern

$$\langle x'_i | x'_j \rangle \stackrel{(2.60)}{=} \frac{1}{a} \delta_{ij} \quad (2.62)$$

Die rechte Seite divergiert zwar im Kontinuumslimes $a \rightarrow 0$, die Riemann-Summe über die rechte Seite bleibt aber endlich und ist unabhängig von a :

$$\sum_i \Delta x' \langle x'_i | x'_j \rangle = \sum_i \Delta x' \frac{1}{a} \delta_{ij} = \sum_i \delta_{ij} = 1 \quad (2.63)$$

Im Kontinuumslimes ist (2.62) also eine Darstellung der Dirac-Delta-Distribution:

$$\Rightarrow \langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'') \quad (\text{Orthogonalität})$$

$$\Rightarrow \int dx' \langle x' | x'' \rangle = 1. \quad (2.64)$$

Man sagt, die Orts-eigenzustände $|x'\rangle$ sind

" δ -normiert".

Sie sind per constructionem Eigenzustände des Ortsoperators

$$\underline{x |x'\rangle = x' |x'\rangle}, \quad x' \in \mathbb{R}, \quad (2.65)$$

vgl. (2.57).

Die Darstellung eines beliebigen Zustands $|y\rangle$ lautet in dieser Ortsbasis:

$$|y\rangle = \mathbb{1} |y\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|y\rangle. \quad (2.66)$$

Die "Matrixdarstellung" des Ortsoperators in der Ortsbasis wird damit

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{x} | x'' \rangle &= x'' \langle x' | x'' \rangle = x'' \delta(x' - x'') \\ &\equiv x' \delta(x' - x''). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Der Ortsoperator ist also "diagonal" in der Ortsbasis.

Diese Überlegungen lassen sich über ein 3-dimensionales Gitter direkt auf den 3-dimensionalen Ortsraum

ausdehnen. Es ergeben sich die wichtigen Relationen:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | \vec{x}'' \rangle &= \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'') \\ \mathbb{1} &= \int d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \\ \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle &= \langle \vec{x}' | \vec{x}' \rangle \end{aligned} \quad (2.68)$$

Hierbei ist \vec{x} der Ortsoperator, der sich als 3-dimensionaler Vektor aus den Ortsoperatoren $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ zusammensetzt.

Der Zustandsvektor $|\vec{x}'\rangle$ diagonalisiert simultan die Operatoren x_1, x_2 und x_3 . Wir können folgern, dass letztere daher kompatible Observable sind:

$$[x_i, x_j] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (2.69)$$

Die 3 Koordinaten eines Teilchens können also simultan beliebig scharf gemessen werden.

Im übrigen dehnt sich das oben beschriebene Messkonzept der Quantenmechanik auch auf

Ortsmessungen aus. Auch eine Ortsmessung ist dadurch definiert, dass sie einen beliebigen Zustand $|y\rangle$ auf einen Ortsigenzustand $|x'\rangle$ projiziert, bzw. die $|x'\rangle$ -Komponente aus $|y\rangle$ herausprojiziert,

$$|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|y\rangle$$

Ortsmessung
 $\longrightarrow \sim |x'\rangle$

(2.70)

Rein mathematisch idealisiert ist zwar eine beliebige scharfe Messung möglich, physikalisch hat aber jeder Detektor eine Ausdehnung Δ (z.B. die Körnung einer Fotoplatte oder eines Pixeldetektors).

Die Ortsmessung ist daher

$$|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x''|y\rangle \xrightarrow{x \text{ Messung}} \int_{x' - \frac{\Delta}{2}}^{x' + \frac{\Delta}{2}} dx'' |x''\rangle \langle x''|y\rangle.$$
(2.71)

Die Koordinate $\langle x''|y\rangle$ bezüglich der Ortsbasis

heißt auch Wellenfunktion.

Unter der Annahme, dass sich die Wellenfunktion wenig über die Ausdehnung des Detektors ändert, erhalten wir aus der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude die

$$\left(\begin{array}{l} \text{Wahrscheinlichkeit für} \\ \text{Ortsmessung bei } x' \\ \text{im Intervall } dx' \end{array} \right) = |\langle x' | \psi \rangle|^2 dx' \quad (2.72)$$

mit $dx' = \Delta$. Das diese Interpretation Sinn macht zeigt sich in der Wahrscheinlichkeit ein Teilchen irgendwo zwischen $-\infty$ und $+\infty$ zu messen:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \psi \rangle|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \psi | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \psi \rangle = 1, \end{aligned} \quad (2.73)$$

wobei $\|\psi\| = 1$ normiert sein soll.

2.8 Translationen

Unser Ziel ist es, die Dynamik von quantenmechanischen Zuständen zu beschreiben. Bevor wir jedoch wirkliche Zeitentwicklung betrachten können, müssen wir verstehen, wie die Verschiebung eines Zustands im Raum realisiert werden kann.

Betrachten wir z.B. einen Zustand, der um ein \vec{x}' herum lokalisiert ist. Nun wollen wir diesen Zustand nach $\vec{x}' + d\vec{x}'$ infinitesimal verschieben, ohne sonstige Eigenschaften des Zustands zu ändern. Wir führen dazu einen Translationsoperator $T(d\vec{x}')$ ein mit der Eigenschaft

$$T(d\vec{x}') |\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle \quad (2.74)$$

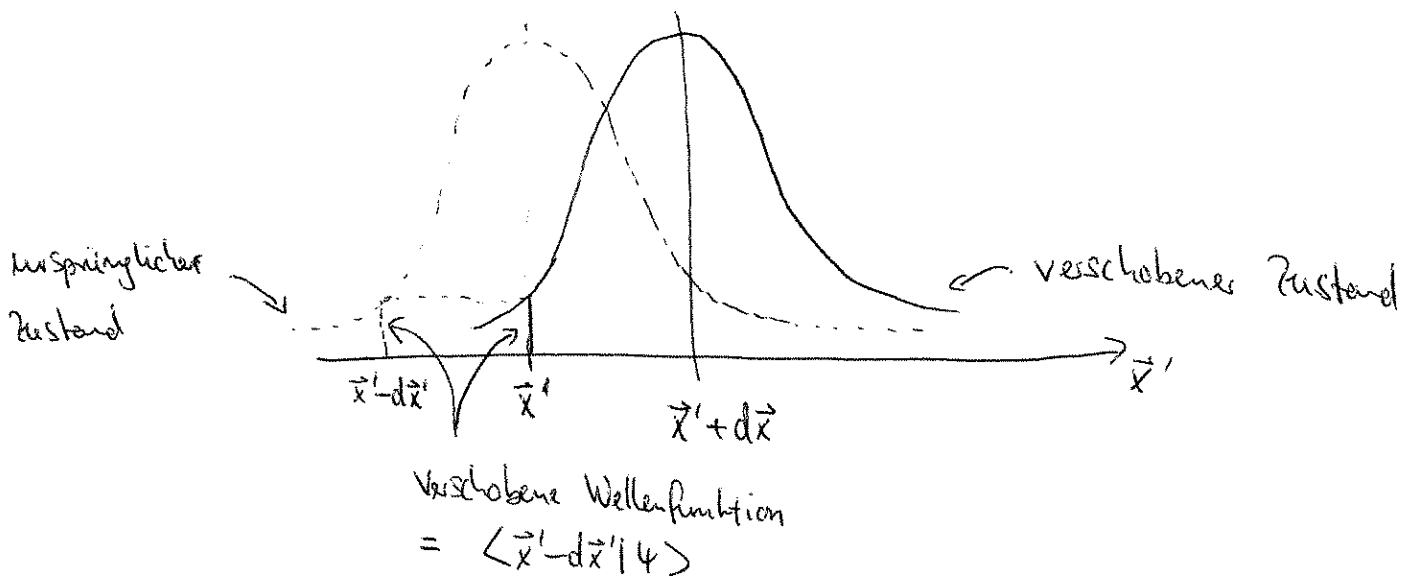
(eine mögliche verlassene relative Phase wählen wir zu 1).

$T(d\vec{x}')$ führt also einen Ortseigenket wieder in einen Ortseigenket allerdings mit verschobenem Eigenwert $\vec{x}' + d\vec{x}'$ über. Offensichtlich ist $|\vec{x}'\rangle$ kein Eigenket von T ,

Auf einem beliebigen Zustand $|\Psi\rangle$ wirkt die Translation wie folgt.

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle &\rightarrow T(d\vec{x}')|\Psi\rangle = T(d\vec{x}') \int d^3\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\Psi\rangle \\
 &= \int d^3\vec{x}' |\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\Psi\rangle \\
 &= \int d^3\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'-d\vec{x}'|\Psi\rangle, \quad (2.75)
 \end{aligned}$$

Wobei wir im letzten Schritt eine Variablensubstitution im Integral gemacht haben. Wir erhalten also den verschobenen Zustand, indem wir die Wellenfunktion bei $\vec{x}'-d\vec{x}'$ auswerten:



Wichtig ist festzuhalten, dass unsere Translation

aktiv den physikalischen Zustand verschiebt. (Alternativ wird in der Literatur auch die passive Verschiebung verwendet, bei der der physikalische Zustand gleich bleibt und das Koordinatensystem um $-\vec{d}\vec{x}'$ verschoben wird.)

Vom Translationsoperator fordern wir folgende wichtige Eigenschaften. Wegen Wahrscheinlichkeitserhaltung muss T unitär sein. Ist z.B. $|\psi\rangle$ auf 1 normiert, soll dies auch für den verschobenen Zustand gelten:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | T_{(d\vec{x}')}^\dagger T_{(d\vec{x}')} | \psi \rangle \quad (2.76)$$

Da $|\psi\rangle$ beliebig, folgt die Unitarität

$$T_{(d\vec{x}')}^\dagger T_{(d\vec{x}')} = \mathbb{1}. \quad (2.77)$$

Wenn wir einen Zustand zweimal verschieben um $d\vec{x}'$ und $d\vec{x}''$, soll das gesamte Resultat durch eine Verschiebung beschreibbar sein:

$$T(d\vec{x}''') T(d\vec{x}'') = T(d\vec{x}' + d\vec{x}'''). \quad (2.78)$$

Eine Verschiebung um $d\vec{x}'$ und dann um $-d\vec{x}'$ soll die Identität sein, d.h.

$$T^{-1}(d\vec{x}') = T(-d\vec{x}'), \quad (2.79)$$

Aud im Limes $d\vec{x}' \rightarrow 0$ soll die Verschiebung ebenfalls die Identität sein:

$$\lim_{d\vec{x}' \rightarrow 0} T(d\vec{x}') = \underline{\underline{1}}. \quad (2.80)$$

Wir wählen folgenden Ansatz für die infinitesimale Translation:

$$T(d\vec{x}') = 1 - i\vec{K} \cdot d\vec{x}' \quad (2.81)$$

mit $\vec{K} = \begin{pmatrix} K_x \\ K_y \\ K_z \end{pmatrix}$ hermitesch $\vec{K}^\dagger = \vec{K}$ und

prüfen die genannten Eigenschaften.

$$\begin{aligned}
 (2.77): \quad T^\dagger(d\vec{x}') T(d\vec{x}') &= (1 + i \vec{k}^\dagger \cdot d\vec{x}') (1 - i \vec{k} \cdot d\vec{x}') \\
 &= 1 - i \underbrace{(\vec{k} - \vec{k}^\dagger)}_{=0} \cdot d\vec{x}' + \mathcal{O}(d\vec{x}'^2) \\
 &\simeq 1. \qquad (2.82)
 \end{aligned}$$

Hierbei arbeiten wir zur Ordnung $(d\vec{x}')^1$, da wir von der Darstellung von $T(d\vec{x}')$ in (2.81) auch nur erwarten, dass sie zur ersten Ordnung richtig ist.

$$\begin{aligned}
 (2.78): \quad T(d\vec{x}'') T(d\vec{x}') &= (1 - i \vec{k} \cdot d\vec{x}'') (1 - i \vec{k} \cdot d\vec{x}') \\
 &= 1 - i \vec{k} \cdot (d\vec{x}' + d\vec{x}'') + \mathcal{O}(d\vec{x}'^2) \\
 &\simeq T(d\vec{x}' + d\vec{x}''). \qquad (2.83)
 \end{aligned}$$

Da $T(-d\vec{x}') \equiv T^\dagger(d\vec{x}')$ und T^\dagger unitär ist, folgt (2.79) automatisch, ebenso wie (2.80). Dies bestätigt den Ansatz (2.81).

Damit können wir eine äußerst wichtige Identität ableiten:

Wir betrachten

$$\vec{x} T(d\vec{x}') | \vec{x}' \rangle = \vec{x} | \vec{x}' + d\vec{x}' \rangle = (\vec{x}' + d\vec{x}') | \vec{x}' + d\vec{x}' \rangle$$

und

$$T(d\vec{x}') \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \vec{x}' T(d\vec{x}') | \vec{x}' \rangle = \vec{x}' | \vec{x}' + d\vec{x}' \rangle .$$

(2.84)

Also

$$[\vec{x}, T(d\vec{x}')] | \vec{x}' \rangle = d\vec{x}' | \vec{x}' + d\vec{x}' \rangle \simeq d\vec{x}' | \vec{x}' \rangle, \quad (2.85)$$

wobei wir wieder höhere Ordnungen in $d\vec{x}'$ vernachlässigt

haben. Da $| \vec{x}' \rangle$ beliebig ist, gilt (2.85) auch

als Operatoridentität $[\vec{x}, T(d\vec{x}')] = d\vec{x}' \mathbb{1}$, bzw

$$d\vec{x}' \mathbb{1} = \vec{x} T(d\vec{x}') - T(d\vec{x}') \vec{x} = \vec{x} - i \vec{x} \vec{K} \cdot d\vec{x}' - \vec{x} + i \vec{K} \cdot d\vec{x}' \vec{x}$$

$$= -i \vec{x} \vec{K} \cdot d\vec{x}' + i \vec{K} \cdot d\vec{x}' \vec{x} \quad (2.86)$$

Wählen wir $d\vec{x}' = dx' \hat{e}_j$ mit Einheitsvektor \hat{e}_j

in j -Richtung im Raum, und multiplizieren wir mit

\hat{e}_i , folgt

$$\hat{e}_i \cdot d\vec{x}' \mathbb{1} = dx' \mathbb{1} \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = dx' \mathbb{1} \delta_{ij}$$

$$= -i \hat{e}_i \cdot \vec{x} \vec{K} \cdot \hat{e}_j dx' + i \vec{K} \cdot \hat{e}_j dx' \hat{e}_i \cdot \vec{x}$$

$$= -i x_i K_j dx' + i K_j x_i dx', \quad (2.87)$$

bzw.

$$[x_i, k_j] = i \delta_{ij} \mathbb{1} \quad (2.88)$$

(oder in Kurzform $[x_i, k_j] = i \delta_{ij}$.)

Die Größe \vec{K} wird Erzeugende der Translationen genannt. Welche physikalische Bedeutung können wir \vec{K} zuordnen?

Das Konzept der Erzeugenden von Translationen (im speziellen bzw. Transformationen im allgemeinen) ist bereits aus der klassischen Mechanik bekannt.

Phasenraumfunktionen können mit Hilfe von kanonischen Transformationen transformiert werden. Die der Translation zugehörige Erzeugende ist der kanonische Impuls \vec{p} . Dies wird z.B. bei der Verschiebung einer Funktion $f(x)$ deutlich:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow f(x+dx) = f(x) + \frac{\partial f(x)}{\partial x} \cdot dx + \mathcal{O}(dx^2) \\ &= f(x) - \{p, f(x)\} dx \\ &\equiv (1 - \{p, \cdot\} dx) f(x). \end{aligned} \quad (2.89)$$

Hierbei haben wir Poisson-Klammer

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} \quad (2.90)$$

verwendet, mit deren Hilfe die Erzeugenden-Struktur der kanonischen Transformationen sichtbar wird.

In Analogie zur klassischen Mechanik können wir also \vec{K} mit dem Impuls \vec{p} in Verbindung bringen.

Aus Dimensionsgründen benötigt diese Zusammenhang jedoch noch einen Faktor der Dimension $1/\text{Wirkung}$.

Wir wählen daher

$$\vec{K} = \frac{\vec{P}}{\hbar}, \quad (2.91)$$

Ob dies sinnvoll ist, ist letztendlich eine experimentelle Frage. In der Tat ist (2.91) der von De Broglie gefundenen (experimentell bestätigten) Welleneigenschaft von Materieteilchen (z.B. Elektronen), bei der die De Broglie-Wellenlänge λ mit dem Impuls zusammenhängt

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad (2.92)$$

Wir können also \vec{K} mit dem Operator identifizieren, der die Wellenzahl $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ entspricht.

Der Translationsoperator wird damit

$$T(d\vec{x}') = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right], \quad (2.93)$$

und wir erhalten aus (2.88) die Vertauschungsrelation

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (2.94)$$

Ort und Impuls eines quantenmechanischen Teilchens sind damit inkompatible Observable, können also nicht gleichzeitig scharf bestimmt werden.

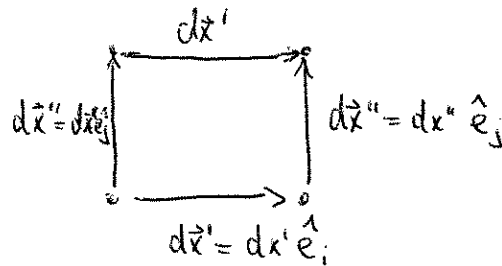
Ihre Varianzen gehorchen der Heisenbergschen

Unschärferelation, die wir aus (2.34) z.B.

für x und p_x folgern:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.95)$$

Eine weitere wichtige Vertauschungsrelation lässt sich aus den Translationen folgern: betrachten wir zwei Translationen in unterschiedliche Richtungen, z.B. in i und j Richtung. Die Reihenfolge der Verschiebungen spielt wegen (2.83) keine Rolle:



$$T(d\vec{x}'') T(d\vec{x}') = T(d\vec{x}' + d\vec{x}'') \equiv T(d\vec{x}') T(d\vec{x}'')$$

$$\Rightarrow 0 = [T(d\vec{x}''), T(d\vec{x}')] \quad (2.96)$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 [\vec{p} \cdot d\vec{x}'', \vec{p} \cdot d\vec{x}']$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 [P_j, P_i] dx'' dx'$$

Wegen Beliebigkeit von $d\vec{x}'', d\vec{x}'$ folgt

$$\underline{\underline{[P_i, P_j] = 0}} \quad (2.97)$$

(NB: Die oben genannten Eigenschaften der Translationen definieren eine Gruppenstruktur: die Gruppe der Translationen. Wenn die Erzeugenden einer Gruppe kommutieren, so wie (2.97), dann heißt die Gruppe "abelsch").

Die Impulsoperatoren sind also jeweils kompatible Observable, d.h. es gibt eine simultane Eigenbasis $|\vec{p}'\rangle$, so dass

$$\vec{p} |\vec{p}'\rangle = \vec{p}' |\vec{p}'\rangle. \quad (2.98)$$

Diese Basis diagonalisiert den Translationsoperator:

$$\begin{aligned} T(d\vec{x}') |\vec{p}'\rangle &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) |\vec{p}'\rangle \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot d\vec{x}'\right) |\vec{p}'\rangle. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Der Eigenwert ist komplex, was zu erwarten war, da $T(d\vec{x}')$ nicht hermitesch sondern unitär ist.

Bislang haben wir nur infinitesimale Transformationen betrachtet. Eine endliche Transformation z.B. von \vec{x}' nach \vec{x}'' können wir aber aus infinitesimalen Transformationen zusammensetzen. Sei

$$(\vec{x}'' - \vec{x}') = N d\vec{x}' \quad \text{im Limes } d\vec{x}' \rightarrow 0, N \rightarrow \infty \quad (2.100)$$

aber $|\vec{x}'' - \vec{x}'| = \text{const.}$

Dann ist

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T(\vec{x}'' - \vec{x}')}} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^N T(d\vec{x}') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}' \right)^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}'' - \vec{x}') \cdot \frac{1}{N} \right)^N \\ &= \underline{\underline{e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}'' - \vec{x}')}}}}, \quad (2.101) \end{aligned}$$

wobei wir die Limes-Darstellung der Exponentialfunktion verwendet haben.

Zusammenfassend halten wir fest, dass wir aus den Eigenschaften der Translationen folgende fundamentale Vertauschungsrelationen gefunden haben:

$$\left\| \begin{array}{l} [x_i, x_j] = 0, [p_i, p_j] = 0, \\ [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \end{array} \right\| \quad (2.102)$$

Diese Struktur ist den klassischen Poisson-Klammern sehr ähnlich. In der Tat beobachtete P.A.M. Dirac 1925, dass viele quantenmechanische Eigenschaften ^{eines Systems} folgen, wenn ich das analoge klassische System kanonisch beschreibe und dann die Poisson-Klammern durch Kommutatoren (und x und p Koordinaten durch Operatoren) ersetze:

$$\{ , \} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [,] . \quad (2.103)$$

Diese Ersetzung wird oft als Quantisierung eines klassischen Systems bezeichnet. In der Tat kann man

die Quantenmechanik axiomatisch auf diesen Ersetzungsregeln aufbauen. Er stößt allerdings auf seine Grenzen, wenn man Systeme beschreiben will, die kein klassisches Analogon haben (wie z.B. Spin- $\frac{1}{2}$ Systeme).

2.9 Wellenfunktionen im Orts- u. Impulsraum

Bezüglich einer orthonormalen Ortsraumbasis lassen sich allgemeine Zustände $|\psi\rangle$ aufspannen

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx' |x'\rangle \langle x'|\psi\rangle \\ &\equiv \int dx' |x'\rangle \psi(x'), \end{aligned} \quad (2.104)$$

wobei wir die Wellenfunktion als

$$\psi(x') := \langle x'|\psi\rangle \quad (2.105)$$

im Ortsraum eingeführt haben. In der Tat lassen sich allgemein Übergangsamplituden im Ortsraum-basis schreiben; z.B.

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \int dx' \langle \psi_1 | x' \rangle \langle x' | \psi_2 \rangle \\ &= \int dx' \psi_1^*(x') \psi_2(x') \end{aligned} \quad (2.106)$$

beschreibt die Übergangsamplitude zwischen zwei Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ mit Hilfe der Wellenfunktionen im Ortsraum. Speziell die

Normierung eines Zustands lautet dann $1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int dx' |\psi(x')|^2$,

$$(2.107)$$

In gleicher Weise ergibt sich z. B. für einen Operator A

$$\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \int dx' \int dx'' \psi_1^*(x') \langle x' | A | x'' \rangle \psi_2(x''), \quad (2.108)$$

d.h. solche innere Produkte können bei Kenntnis der Wellenfunktionen und der Matrixelemente $\langle x' | A | x'' \rangle$ im Ortsraum ausgewertet werden.

Eine wichtige Vereinfachung ergibt sich, falls

$A = f(x)$ eine reine Funktion vom Ortsoperator x ist:

$$\langle x' | f(x) | x'' \rangle = f(x') \langle x' | x'' \rangle = f(x') \delta(x' - x'')$$

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \int dx' \psi_1^*(x') f(x') \psi_2(x'). \quad (2.109)$$

Es ergibt sich ein einfaches Integral.

Verallgemeinerungen auf den 3-dimensionalen Raum sind trivial.

Nun studieren wir, wie der Impulsoperator in der Ortsraumbasis aussieht; da Ort und Impuls inkompatible Observable sind, kann p keine Diagonalgestalt bezüglich der Ortsbasis haben. Wir betrachten erneut infinitesimale Translationen (in einer Dimension):

$$\begin{aligned}
 T(dx') | \psi \rangle &= \left(1 - \frac{i p dx'}{\hbar} \right) | \psi \rangle = \int dx' T(dx' | x') \langle x' | \psi \rangle \\
 &= \int dx' | x'+dx' \rangle \langle x' | \psi \rangle \\
 &= \int dx' | x' \rangle \langle x'-dx' | \psi \rangle \\
 &= \int dx' | x' \rangle \psi(x'-dx') \\
 &\approx \int dx' | x' \rangle \left(\psi(x') - dx' \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x') \right),
 \end{aligned}
 \tag{2.110}$$

Wobei Terme der Ordnung $\mathcal{O}(dx'^2)$ wieder vernachlässigt werden. Koeffizientenvergleich zur Ordnung dx' liefert

$$\Rightarrow p | \psi \rangle = \int dx' | x' \rangle \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x') \right)$$

bzw

$$\underline{\underline{\langle x' | p | \psi \rangle = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \psi \rangle \equiv -i \hbar \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x')}}. \tag{2.111}$$

Bezüglich der Ortsbasis kann der Impulsoperator also als ein Ableitungsoperator dargestellt werden.

Ähnlich folgt:

$$\langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle = \int dx' \psi_1^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi_2(x')$$

$$\langle x' | p^m | \psi \rangle = (-i\hbar)^m \frac{\partial^m}{\partial x'^m} \psi(x'). \quad (2.112)$$

Bislang haben wir rein in der Ortsbasis gearbeitet.

Es besteht aber zwischen Orts- und Impulsbasis eine vollständige Analogie. D.h. bezüglich der Impulsbasis $\{|p'\rangle\}$ mit

$$p |p'\rangle = p' |p'\rangle \quad (2.113)$$

lautet die Darstellung eines Zustands

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dp' |p'\rangle \langle p' | \psi \rangle \\ &\equiv \int dp' |p'\rangle \psi(p') \end{aligned} \quad (2.114)$$

mit der Impulsraum Wellenfunktion $\psi(p') = \langle p' | \psi \rangle$

(NB: Wir verzichten darauf ein neues Symbol wie z.B. $\tilde{\Psi}(p')$ einzuführen. Es sollte klar sein, dass $\Psi(x') = \langle x' | \Psi \rangle$ und $\Psi(p') = \langle p' | \Psi \rangle$ zwei völlig verschiedene Funktionen sein können.)

Der Zusammenhang zwischen Orts- und Impulsbasis ist in der Übergangsamplitude $\langle x' | p' \rangle$ codiert.

Für diese Amplitude lässt sich eine Differentialgleichung ableiten:

$$\begin{aligned} \langle x' | p | p' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle \\ &= \underline{p'} \langle x' | p' \rangle, \end{aligned} \quad (2.115)$$

d.h.

$$\langle x' | p' \rangle = N e^{\frac{i}{\hbar} p' x'}, \quad (2.116)$$

mit einer noch zu bestimmenden Normierung N .

Diese ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} \delta(x' - x'') &= \langle x' | x'' \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle \\ &= |N|^2 \int dp' e^{\frac{i}{\hbar} p' (x' - x'')} = 2\pi\hbar |N|^2 \delta(x' - x''), \end{aligned} \quad (2.117)$$

wobei wir die Fourier-Darstellung der δ -Distribution verwendet haben:

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \quad (2.118)$$

Wählen wir N positiv und reell, so folgt

$$\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p' x'} \quad (2.119)$$

Damit lässt sich der Zusammenhang zwischen Wellenfunktionen in Orts- und Impulsbasis formulieren:

$$\begin{aligned} \psi(x') = \langle x' | \psi \rangle &= \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' e^{\frac{i}{\hbar} p' x'} \psi(p') \end{aligned} \quad (2.120)$$

und ähnlich

$$\psi(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{\frac{i}{\hbar} p' x'} \psi(x') \quad (2.121)$$

Der Basiswechsel ist also eine Fourier-Transformation.

Die Verallgemeinerung auf 3 Dimensionen ist wieder trivial.

Die zugehörigen Ket und Bra Vektorräume faktorisieren
und es folgt z.B.

$$\langle \vec{x}' | \vec{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \quad (2.122)$$

etc.