

Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 5
Verträgliche Messgrößen und Erwartungswerte

Wintersemester 15/16

Das dritte Postulat der Quantenmechanik befasst sich mit möglichen Messresultaten für Quantensysteme:

Wenn ein System durch die Wellenfunktion Ψ beschrieben wird, dann entspricht der mittlere Messwert einer Observablen A dem Erwartungswert des entsprechenden Operators $\hat{A}$.

Es gilt also:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi \, d\tau}{\int \Psi^* \Psi \, d\tau}$$

Ist Ψ ein Eigenzustand von $\hat{A}$, so ergibt die Messung stets den zugehörigen Eigenwert. Ist dies nicht der Fall, so fällt das System durch die Messung stets in einen Eigenzustand von $\hat{A}$, wobei jeder dieser Eigenzustände mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit auftritt.

1 Kommutatoren und verträgliche Messgrößen

- a) (i) Berechnen Sie den Kommutator $[\frac{d}{dx} - x, \frac{d}{dx} + x]$ durch Anwendung auf $\psi(x)$.
- (ii) Zeigen Sie: Das Produkt zweier hermitescher Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ist wiederum hermitesch, wenn die beiden Operatoren kommutieren.
- (iii) Wie lautet die Heisenbergsche Unschärferelation? Was sind verträgliche Observablen? Wie hängen diese Begriffe mit dem Kommutator zweier Operatoren zusammen?
- b) Gegeben seien die Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ sowie der Orts- ($\hat{x}$) bzw. Impuls-Operator ($\hat{p}$).

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \hat{p} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Ist die gleichzeitige exakte Messung folgender Größen möglich?

- (i) x -Koordinate und y -Koordinate
- (ii) x -Koordinate und Impuls in y -Richtung
- (iii) x -Koordinate und Impuls in x -Richtung
- (iv) Impulse in x - und y -Richtung

Sind Ort und Impuls insgesamt verträgliche Observablen oder nicht?

- c) (i) Berechnen Sie den Kommutator für den Hamilton-Operator $\hat{H}$ des Harmonischen Oszillators und den Orts-Operator $\hat{x}$ durch Anwendung auf $\psi(x)$. Sind für einen Harmonischen Oszillator die Energie und der Ort verträgliche Messgrößen?

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \quad \hat{x} = x. \quad (2)$$

(ii) Berechnen Sie den Kommutator für den Hamilton-Operator $\hat{H}$ des freien Teilchens und den Impuls-Operator $\hat{p}$ durch Anwendung auf $\psi(x)$. Sind für ein freies Teilchen die Energie und der Impuls verträgliche Messgrößen?

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (3)$$

2 Entwicklung in Eigenfunktionen und Variationsprinzip

Es soll das Variationsprinzip für den Grundzustand bewiesen werden:

In der Menge aller bezüglich der Randbedingungen zulässigen Wellenfunktionen ist der Energieerwartungswert E_Ψ für die exakte Grundzustandswellenfunktion minimal, d. h.

$$E_\Psi = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 \quad (4)$$

wobei E_0 eben jener tiefst mögliche Erwartungswert der exakten Wellenfunktion sein soll. Entsprechend der obigen Beschreibung sei Ψ eine Testwellenfunktion (z.B. eine näherungsweise Lösung der Schrödingergleichung). Diese lässt sich ausdrücken als Linearkombination der exakten orthonormierten Eigenfunktionen Ψ_i von $\hat{H}$, was als Entwicklung in Eigenfunktionen bezeichnet wird:

$$\Psi = \sum_i c_i \Psi_i \quad (5)$$

(i) Zeigen Sie für die in Eigenfunktionen entwickelte Testwellenfunktion Ψ :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 \quad (6)$$

(ii) Zeigen Sie weiterhin für Ψ

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 E_i \quad (7)$$

Nutzen Sie für die Beschreibung von $\hat{H}|\Psi\rangle$ die Entwicklung in Eigenfunktionen sowie die stationäre Schrödingergleichung für alle exakten Eigenfunktionen Ψ_i von $\hat{H}$.

(iii) E_0 ist der kleinste aller Eigenwerte E_i der exakten Eigenfunktionen Ψ_i . Zeigen Sie unter Verwendung der Ergebnisse aus (i) und (ii) die Gültigkeit der Ungleichung (4). Wann gilt das Gleichheitszeichen?

3 Messung und Erwartungswert

Ein Quantensystem befinde sich vor einer Messung im Zustand $|\Psi\rangle$. Durch die Messung einer Observable A geht das System in einen Eigenzustand $|a_i\rangle$ des zugehörigen Operators $\hat{A}$ über - als Messergebnis erhält man den entsprechenden Eigenwert a_i . Die Messung geht also mit einer Projektion auf eine Eigenfunktion $|a_n\rangle$ von $\hat{A}$ einher, was mathematisch durch den Projektionsoperator $\hat{P}_n$ beschrieben wird.

$$|\Psi\rangle \xrightarrow[\text{Projektion } \hat{P}_n]{\text{Messung}} |a_i\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{P}_n = |a_n\rangle \langle a_n| \quad (8)$$

Die Eigenzustände $|a_i\rangle$ von $\hat{A}$ seien orthonormal und bilden eine vollständige Basis, so dass auch der Zustand $|\Psi\rangle$ vor der Messung in den Eigenfunktionen entwickelt werden kann:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_i |c_i|^2 = 1 \quad (9)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand $|\Psi\rangle$ in einen Zustand $|a_n\rangle$ übergeht, ist:

$$P_{\Psi, a_n} = |\langle a_n | \Psi \rangle|^2 \quad (10)$$

a) (i) Zeigen Sie durch Anwenden auf Ψ , dass $\hat{P}_n$ tatsächlich die n-te Eigenfunktion des Operators $\hat{A}$ erzeugt. Verwenden Sie Gl. (8) und (9).

(ii) Zeigen Sie unter Nutzung von Gl. (10) und (9), dass gilt:

$$P_{\Psi, a_n} = |c_n|^2 \quad (11)$$

(iii) Es wird eine einzelne Messung der Observable A durchgeführt. Welche Messwerte können erhalten werden? Mit welcher Wahrscheinlichkeit werden die Werte jeweils erhalten?

(iv) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert des Operators $\hat{A}$ wie folgt definiert ist.

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_i a_i |c_i|^2 \quad (12)$$

Hinweis: Ersetzen Sie $|\Psi\rangle$ entsprechend Gl. (9) und beachten Sie, dass alle $|a_i\rangle$ Eigenfunktionen von $\hat{A}$ sind.

b) (i) Ein System sei bereits vor der Messung im Zustand $|\Psi\rangle = |a_n\rangle$, also in einem Eigenzustand des Operators $\hat{A}$. Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das System auch nach der Messung in diesem Zustand?

(ii) Was ändert sich für den Erwartungswert in Gl. (12), wenn $|\Psi\rangle$ bereits Eigenfunktion von $\hat{A}$ ist?

(iii) Der lineare hermitesche Operator $\hat{A}$ habe abzählbar unendlich viele Eigenwerte a_i mit orthonormierten Eigenzuständen $|a_i\rangle$. Die Observable A soll am System $|\Psi\rangle$ gemessen werden.

$$\Psi = 12|a_1\rangle - 5i|a_2\rangle$$

Normieren Sie zunächst die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$.

Mit welcher Wahrscheinlichkeit werden die Werte a_1 , a_2 und a_3 gemessen? Berechnen Sie mithilfe von Gl. (10) oder (11). Was ist der mittlere Messwert?