4. Erwartungswert von Meßgrößen, Operatoren, Ehrenfestsche Sätze, Heisenbergsche Vertauschungsrelationen, Heisenberg-Bild

4.1 Orts- und Geschwindigkeitsmessung

Ortsmessung: $\langle\vec{x}\rangle := \int d^3x\, \vec{x}\, |\psi(\vec{x},t)|^2$

aus der Def. der Wahrscheinlichkeitsamplitude

Geschwindigkeitsmessung:

erinnere $\underset{\text{Wellenbild}}{\vec{v}_{GR}} \sim \underset{\text{Teilchen}}{\left|\frac{\vec{p}}{m}\right|}$ war das heuristische (Korrespondenz) Prinzip, die Schrödingergl. hinzuschreiben (bzw. "gelehrt": Ham. Jac.)

$$\boxed{\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}} \quad (\hbar k)$$

in Wellengleichung

$$\langle\vec{v}\rangle = \left\langle\frac{\vec{p}}{m}\right\rangle := \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\,\frac{\hbar}{im}\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$

im Fourier-Raum

$$\psi(\vec{x},t) = \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left\{e^{i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{x}-\frac{E}{\hbar}t\right)}\tilde{\varphi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)\right\}$$

... für freien Fall, sonst ohne $e^{-iEt/\hbar}$

$$\left\langle\frac{\vec{p}}{m}\right\rangle = \int d^3x\int\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\times$$

$$\left\{e^{-i\left(\frac{\vec{p}'}{\hbar}\vec{x}-\frac{E'}{\hbar}t\right)}\underbrace{\frac{\hbar}{im}\vec{\nabla}e^{i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{x}-\frac{E}{\hbar}t\right)}}_{\vec{p}/m\, e^{i\vec{p}/\hbar\,\vec{x}}}\tilde{\varphi}^*\left(\frac{\vec{p}'}{\hbar}\right)\tilde{\varphi}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)\right.$$

28

wie bei $\int \psi^* \psi$ $=$ $\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\delta_3\left(\frac{\vec p}{\hbar} - \frac{\vec p'}{\hbar}\right)(2\pi)^3}_{\hbar^3 \delta_3(\vec p - \vec p')} \tilde\varphi^*\left(\frac{\vec p'}{\hbar}\right) \frac{\vec p}{m} \varphi\left(\frac{\vec p}{\hbar}\right)$

$e^{-i\left(\frac{E}{\hbar} - \frac{E'}{\hbar}\right)t}$

$= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \underbrace{\tilde\varphi^*\left(\frac{\vec p}{\hbar}\right)}_{\text{Zustandsfunktion im Impulsraum, auch auf 1 normiert:}} \underbrace{\frac{\vec p}{m}}_{\text{zwischen } \tilde\varphi^* \text{ und } \tilde\varphi \text{ "gesandwicht"}} \tilde\varphi\left(\frac{\vec p}{m}\right)$ (hier verstehen Sie, warum "Profis" $\hbar = 1$ setzen!)

$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde\varphi^* \tilde\varphi\left(\frac{\vec p}{m}\right) = 1$, $|\tilde\varphi|^2$ Wahrscheinlichkeitsdichte im "Impulsraum"

$\vec x$ und $\frac{\hbar}{i}\vec\nabla$ sind beides lineare Operatoren $\vec x_{op}, \vec p_{op}$

im Raum der (quadratintegrablen) Funktionen (L^2)

$\vec x_{op}$ multipliziert ψ mit x

$\vec p_{op}$: $\frac{\hbar}{i}\vec\nabla$ auf ψ

Math: lineare (u. homogene) Operatoren $\mathcal{O}$

$$\mathcal{O}\Big(\alpha_1 \underbrace{\psi_1(x)}_{\text{schreiben } \psi(\cdot)} + \alpha_2 \psi_2(x)\Big) = \alpha_1 \mathcal{O}(\psi_1) + \alpha_2 \mathcal{O}(\psi_2)$$

$$\psi(\cdot) \xrightarrow{\mathcal{O}} (\mathcal{O}\psi)(\cdot)$$

Bem. "linear" aus Superpositionsprinzip

"homogen": Normierung auf 1 ist willkürlich

$$\frac{(\alpha\psi, O\alpha\psi)}{(\alpha\psi, \alpha\psi)} = \frac{(\psi, O\psi)}{(\psi, \psi)}$$

---

beobachte: $\tilde{x}_{op}$ und $\tilde{p}_{op}$ vertauschen nicht

(Vorgriff: kann nicht simultan Ort + Impuls messen → siehe später)

$$[p_j, x_k] = p_j x_k - x_k p_j = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_j} x_k - x_k \frac{\partial}{\partial x_j}\right)$$

(!anzuwenden auf ψ-Funktionen) $= \frac{\hbar}{i}\delta_{jk}$

$$[x_j, x_k] = 0$$

$$[p_j, p_k] = 0$$

HEISENBERG'sche Vertauschungsrelationen

$$\underline{[x_j, x_k] = 0} \quad , \quad \underline{[p_j, p_k] = 0}$$

HEISENBERGSCHE VERTAUSCHUNGSRELATIONEN!

4.2. Ehrenfestsche Sätze, hermitesche Operatoren

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \; \Big\{ \psi^* \vec{x} \; \overbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x},t)}^{H_{op}\psi \text{ Schröd. gl.}}$$

$$- \Big(\underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x},t)}_{H_{op}\psi} \Big)^* \; \vec{x} \; \psi(\vec{x},t) \Big\}$$

Diff. in innen!

$$= \int d^3x \; \{ \psi^* (\vec{x} H_{op}) \psi - (H_{op}\psi)^* \vec{x} \psi \} \quad (*)$$

30.10.07

Kurzschreibweise $=: (\psi, \vec{x} H_{op} \psi) - (H_{op}\psi, \vec{x}\psi)$

$(\psi_1, \mathcal{O} \psi_2) =: (\mathcal{O}^+ \psi_1, \psi_2)$ definiert hermitesch adjungierten Operator

Falls $\boxed{\mathcal{O}^+ = \mathcal{O} \quad \rightarrow \text{hermitescher Operator}}$

(~ selbstadjungierte Operator falls Def.-Bereiche gleich!) ~ Math. Kap.

erinn. Diskussion der Erhaltung der Wahrscheinlichkeit!:

H_{op} ist hermitesch!

"$\vec{x}_{op}$" ist hermitesch (trivial in dieser Schreibweise

$$(*) = \int d^3x \; \Big\{ \psi^* \big(\overbrace{\vec{x} H_{op} - H_{op} \vec{x}}^{[\vec{x}, \vec{H}]} \big) \psi \Big\}$$

$$[\vec{x}, H_{op}] = [\vec{x}, \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})] = [\vec{x}, \frac{\vec{p}^2}{2m}]$$

$$[x_i, p_j] = -\frac{\hbar}{i}\delta_{ij}$$

$$((\vec{x})\vec{p}^2 - \vec{p}^2(\vec{x})) = x_i \, \text{"}\underbrace{p_j^2}_{\substack{\text{Summe über } j \\ x_i \sum_j p_j p_j}}\text{"} - \text{"}p_j^2\text{"} x_i$$

füge an gelegentlich "Op" hinzu, um Dinge zu verdeutlichen!

$$= \sum_j (p_j x_i - \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}) p_j = \sum_j (p_j^2 x_i - \frac{2\hbar}{i}\delta_{ij} p_j)$$

$$= -\frac{2\hbar}{i} p_i$$

kürze $i\hbar$:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{2}{2m}\int d^3x \{\psi^* \underbrace{\vec{P}_{op}}_{\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}} \psi(\vec{x},t)\}}$$

"Impulsoperator"

"nochmal" ..

$$\boxed{= \frac{1}{m}\text{"}\langle\vec{P}\rangle\text{"}}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{x}\rangle = \frac{-i}{m\hbar}\int d^3x \{\psi^* [\vec{P}_{op}, H_{op}] \psi\}$$

$$= \frac{i}{m\hbar}\int \dots \quad [H_{op}, \vec{p}] \dots$$

$$[H_{op}, \vec{P}_{op}] \overset{!}{=} [V(\vec{x}), \vec{P}_{op}] = -\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} V(\vec{x})$$

$$\curvearrowright \boxed{m\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{x}\rangle = -\int d^3x \{\psi^* \vec{\nabla} V \psi\} = \langle \underbrace{-\vec{\nabla} V}_{\text{Kraft "}\vec{F}\text{"}} \rangle}$$

und die "Ehrenfest'schen Sätze" (31)

4.3 Allgemeines Gerüst

Vorschlag: klassische Variablen $\vec{x}, \vec{p}, \underset{\sim}{H}$ .. (Energie) ("Observable")

(i) entsprechen linearen Operatoren

klass.	Op.
$\vec{x}$	$\vec{x}$
$\vec{p}$	$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$
$[\vec{x} \times \vec{p}]$	$[\vec{x} \times \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}]$ ← Reihenfolge (s.u.): wie $\nabla \times \vec{x} = 0$!
$\vdots$	

} ein wesentlicher Teil der Observablen läßt sich durch $\vec{x}, \vec{p}$ darstellen ... Reihenfolge? Übung!

(ii) Erwartungswerte sollen durch

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

gegeben sein.

Diese sind reell!

$$(\psi, \mathcal{O}\psi)^* = (\mathcal{O}\psi, \psi) =: (\psi, \mathcal{O}^+\psi) \overset{!}{=} (\psi, \mathcal{O}\psi)$$

$$\forall \psi$$

$$\rightarrow \boxed{\mathcal{O} = \mathcal{O}^+ \text{ hermitesch}}$$

Bem. ist äquiv.

$$\int \psi_1^* \mathcal{O} \psi_2 \, d^3x = \int d^3x \, (\mathcal{O}\psi_1)^* \psi_2 \quad \forall \psi_{1,2}$$

(Bew. Übung?!)

(iii) die Operatoren sind linear, homogen

$$\mathcal{O}(\psi_1+\psi_2) = \mathcal{O}\psi_1 + \mathcal{O}\psi_2$$
$$\mathcal{O}(\alpha\psi) = \alpha\,\mathcal{O}\psi$$

erinner Grund:
- Verteilung von lin. Superpos. + Operator-action
- **Normierung**

(iv) allgemeine zeitliche Veränderung des Erwartungswerts einer Observable

$$\frac{d}{dt}\langle\mathcal{O}\rangle = \frac{i}{\hbar}\int d^3x\,\left\{\psi^*\,[H_{op},\mathcal{O}]\,\psi + \psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{O}\right)\psi\right\}$$

$$\boxed{\langle\mathcal{O}\rangle^{\cdot} = \left\langle \frac{i}{\hbar}[H_{op},\mathcal{O}] + \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{O}\right\rangle}$$

Bem. Dies ist Analog zu POISSON-KLAMMER der klass. Mechanik!

$$[u,v]_{\substack{q,p\\ \text{Poisson}}} = \sum_k \left\{\frac{\partial u}{\partial q_k}\frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k}\frac{\partial v}{\partial q_k}\right\}$$

$$\frac{d}{dt}u(p(t),q(t),t) = -[H,u]_{\substack{p,q\\ \text{Poisson}}} + \frac{\partial u}{\partial t}$$ mit Hamiltonschen Gl. $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot q$, $\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot p$

Quantisierung (Dirac):

$$\boxed{[\text{Poisson}]_{p,q} \longrightarrow \frac{-i}{\hbar}[\text{Kommutator}]}$$

z.B. $[p_k, q_j]_{\substack{PQ\\ \text{Poisson}}} = -\delta_{kj} \;\Rightarrow\; [P_k, X_j] = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{-1}\delta_{kj}$

! Wichtige Methode der Quantisierung !

4.4 Heisenberg-Bild

die Schrödinger-Gleichung $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = H\psi(x,t)$

kann man "integrieren":

(unitäre Transf. U
$U = e^{-iH/\hbar(t-t_0)}$)

$$\boxed{\psi(x,t) = e^{-iH/\hbar(t-t_0)}\psi(x,t_0)}$$

im Sinne der Taylorentw... !!

mit $\psi = \psi(x,t_0)$ bei $t = t_0$ $\qquad e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots$

(*) $\int d^3x\, \psi^* \mathcal{O}_s \psi = \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t_0)\, \underbrace{e^{iH/\hbar(t-t_0)}\mathcal{O}_s e^{-iH/\hbar(t-t_0)}}_{\mathcal{O}_H}\psi(\vec{x},t_0)$

wähle Zustandsfunktion im "HEISENBERG-Bild":

zeitunabhängig $\psi(\vec{x},t_0) = \psi_H(\vec{x})$ $\quad t_0 = 0$!

d $\mathcal{O}_s \to \boxed{e^{iH/\hbar(t-t_0)}\mathcal{O}_s e^{-iH/\hbar(t-t_0)} = \mathcal{O}_H}$

die zeitunabhängigen Operatoren $\mathcal{O}_s$ im "Schrödinger-Bild" (bis auf explizite Zeitabhängigkeit) werden zu zeitabhängigen Operatoren im "Heisenberg-Bild".

Erwartungswerte sind Bild-unabhängig! (siehe (*))

die zeitliche Änderung von Erwartungswerten kommt im Heisenberg-Bild über die Operatoren (siehe S. 32)

$$\boxed{\dot{\mathcal{O}}_H = \frac{i}{\hbar}[H_{op}, \mathcal{O}_H] + \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{O}_H}$$

die sog. Heisenberg-Gleichung

Wdhl.

"Observable" $\vec{p}, \vec{x}, \vec{x} \times \vec{p} \ldots \to$ lin. Operatoren $\mathcal{O}$

hermitesch – reelle Erwartungswerte

$$(\psi, \mathcal{O}\psi)^* = (\mathcal{O}\psi, \psi) \overset{\text{def.}}{=} (\psi, \mathcal{O}^+\psi)$$

$$\underset{\text{reell}}{\overset{!}{=}} (\psi, \mathcal{O}\psi)$$

$$\curvearrowright \mathcal{O} = \mathcal{O}^+$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle^\circ = \langle \frac{i}{\hbar}[H, \mathcal{O}] + \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{O} \rangle$$

Ersetze Poissonkl. $\longrightarrow \frac{-i}{\hbar}$ Kommutator

$$(\psi | \mathcal{O}\psi) = (\mathcal{U}\psi_H | \mathcal{O}\,\mathcal{U}\psi_H) = (\psi_H | \underbrace{\mathcal{U}^+\mathcal{O}\,\mathcal{U}}_{\mathcal{O}_H}\psi_H)$$

$\psi(\vec{x},t) = \underset{\text{unitär!}}{\mathcal{U}}\,\psi_H(\vec{x})$ Lösung der Schrödinger Gl.

$\mathcal{U} = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}$ Exponentialreihe! , $\psi_H(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, t_0)$, $t_0 = 0$ üblich

$\psi = \psi_S$, $\mathcal{O} = \mathcal{O}_S$ Schrödinger Bild

$\mathcal{O}_H$, ψ_H Heisenberg Bild

$\mathcal{U}^+\mathcal{U} = 1$ $\quad$ $\mathcal{U}^+ = e^{+i\frac{H^+}{\hbar}(t-t_0)} = e^{i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}$ durch in Exponentialreihe!

im Heisenberg-Bild

$$\boxed{\dot{O}_H = \frac{i}{\hbar}[H, O_H] + \frac{\partial}{\partial t} O_H}$$

da $$U^\dagger [H, O] U = [H, U^\dagger O U] = [H, O_H]$$

mit $$U^\dagger H \underbrace{U}_{e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}} = H U^\dagger U = U^\dagger U H = \underline{\underline{H}}$$

(H vertauscht mit H)

d.h. $H_H = H_{Sch}$

Unitärer Operator $\mathcal{U} = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$ (im Raum der quadratintegr. Funktionen L_2 i.. opt..)

gilt $\boxed{\mathcal{U}^+\mathcal{U} = \mathcal{U}\mathcal{U}^+ = 1}$

$\mathcal{U}$ erhält die "Länge" des Zustandsvektors $\psi(x)$

$$(\mathcal{U}\psi, \mathcal{U}\psi) = \int d^3x \, (\mathcal{U}\psi(x))^* \, \mathcal{U}\psi(x)$$

$$= \int d^3x \, \psi^*(x) \, \mathcal{U}^+\mathcal{U}\psi(x) \quad \forall \psi$$

$\stackrel{!}{=} (\psi, \psi) \qquad \curvearrowright \mathcal{U}^+\mathcal{U} = \mathbb{1}$

! ähnlich wie die orthogonalen Transformationen (Drehungen, Spiegelungen) in der Mechanik, dort

$$\boxed{\mathcal{O}^T\mathcal{O} = \mathcal{O}\mathcal{O}^T = 1}$$

(hier allerdings in einem komplexen Vektorraum ...)

vgl. körperfest / raumfestes System bei Kreiselproblemen..