6. Schwankungen um den Mittelwert, Eigenzustände, Vollständigkeit, Meßwerte, Meßwahrscheinlichkeit

$\psi(\vec{x})$ führt auf statistische Verteilung: Unterschiede zum "klassischen" Fall?

6.1 Mittlere quadratische Abweichung (Varianz)

$$\overline{(Q-\overline{Q})^2} = (\Delta Q)^2 = \overline{Q^2} - 2\overline{Q}\,\overline{Q} + \overline{Q}^2 = \overline{Q^2} - \overline{Q}^2$$

$\Delta Q = 0$ für scharfen Meßwert

$$\int d^3x\, \psi^* (Q-\overline{Q})^2 \psi = \int d^3x \{(\underset{\substack{\uparrow\\ \text{hermitesch}}}{Q} - \overline{Q})\psi\}^* (Q-\underset{\substack{\uparrow\\ \text{reell!}}}{\overline{Q}})\psi$$

$$\geqslant 0$$

$\underset{\text{"scharf"}}{=0} \quad \rightarrow \quad (Q-\overline{Q})\psi_{\overline{Q}} = 0$ oder $Q\psi_{\overline{Q}} = \overline{Q}\psi_{\overline{Q}}$

$\psi_{\overline{Q}}$ ist dann Eigenzustand (-funktion) von Q zum Eigenwert $\overline{Q}$; $\psi_{\overline{Q}}$ sollte normierbar sein!

Bemerkung: hier synonym: Eigenzustand, Eigenfunktion, Eigenvektor... siehe später!

6.2: Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal, wenn Q hermitesch ("symmetrisch", vgl. reelle symm. $n \times n$ Matrizen!) ist.

$(\psi_1, \psi_2) = 0$ heißt: ψ_1 ist orthogonal zu ψ_2

$$= \int d^3x\, \psi_1^* \psi_2$$

Bew. $(\psi_2 / Q\psi_1 = q_1\psi_1$

$(\psi_1 / Q\psi_2 = q_2\psi_2$ $\rightarrow$ $(\psi_2, Q\psi_1) = q_1(\psi_2,\psi_1)$

$(\psi_1, Q\psi_2) = q_2(\psi_1,\psi_2)$

hermitesch

$\Downarrow$

$(\psi_2, Q\psi_1)^* = q_2(\psi_2,\psi_1)^*$

Erinnere
q_1, q_2 reell !
(multiplis. mit ψ_1/ψ_2 ...)

$$\rightarrow (\psi_2, Q\psi_1) = q_1(\psi_2,\psi_1) = q_2(\psi_2,\psi_1)$$

$q_1 \neq q_2 \quad \curvearrowright \quad (\psi_1,\psi_2) = 0$ also Orthonormal $\boxed{(\psi_n,\psi_m) = \delta_{nm}}$

6.3 Manche Operatoren haben nicht normierbare "uneigentliche" Eigenvektoren, z.B. der Impulsoperator

$\mathbb{P}_{op}\psi_{\vec p} = \vec p\,\psi_{\vec p}$, d.h. $\frac{\hbar}{i}\vec\nabla\psi_{\vec p}(\vec x) = \vec p\,\psi_{\vec p}(\vec x)$

$$\psi_{\vec p}(x) = e^{i/\hbar\,\vec p\cdot\vec x}$$

ist nicht im $\mathbb{R}^3$ normierbar!

formal $\int d^3x\; \psi^*_{\vec p}(\vec x)\,\psi_{\vec p'}(\vec x) = \int d^3x\, e^{i(\vec p-\vec p')\vec x/\hbar}$

(haben wir bei Fourier-Transf. benutzt!) $= (2\pi\hbar)^3\,\delta^3(\vec p-\vec p')$

Bem. einfacher: rechne in endlichen Volumen (Kasten) mit periodischen Randbedingungen! $\underbrace{2ipa}_{\text{Kantenlänge}}/\hbar = 2\pi i n$

dann $a \rightarrow \infty$

<u>endliches</u> Volumen: (Kantenlänge $2a$)

1 dim. $$\int_{-a}^{+a} dx\, e^{i(p-p')x/\hbar} = \frac{\hbar}{i(p-p')} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} \Big|_{-a}^{+a}$$

α) periodische Randbed. $2 \underline{\underline{p_n}} a/\hbar = 2\pi n \qquad (n = 0, 1, \ldots)$

diskrete $p = p_n$

$$\rightarrow \underline{\underline{2a}}\, \delta_{nn'}$$

norm. faktor

β) ohne period. Randbed.

$$= \frac{\hbar}{p-p'}\, 2 \sin \left(\frac{(p-p')a}{\hbar}\right)$$

mit $\displaystyle \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, f(k) \frac{\sin ka}{k} \Rightarrow f(0)$ für $a \to \infty$

gilt $\displaystyle \frac{1}{\pi} \frac{\sin ka}{k} \Rightarrow \delta(k)$

dann $\displaystyle \beta) \Rightarrow 2\pi\, \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar\, \delta(p-p')$

obiges (p. 41) Resultat!

normierbare Zustandsfunktionen durch Bildung von Wellenberg, siehe Anfang der Vorlesung

6.4 Entwicklung nach Eigenfunktionen, Vollständigkeit

zunächst: diskretes Spektrum

Der Meßgröße entspr. hermitescher Operator Q; Meßwert q_n

$$Q\psi_n = q_n\psi_n \qquad n = 1,2,\ldots\ ;\ \{\psi_n\} \text{ orthogonal, orthonormal}$$

bilde

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$$

dann: $\overline{Q} = (\psi, Q\psi) = \sum_{n=1}^{\infty} q_n\, c_n^* c_n$ ... mit $(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} q_n |c_n|^2$$

speziell $Q = 1_{op}$ — mit $(\psi_n, \psi) = c_n$

$$(\psi,\psi) = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \qquad \boxed{\to \psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n (\psi_n, \psi)}$$

Interpretation: $|c_n|^2$ ist Wahrscheinlichkeit, im Zustand ψ den Meßwert q_n zu finden

$c_n = (\psi_n, \psi)$: dann folgt aus $(\psi_1, \psi_2) = 0$: Wahrscheinlichkeit, in ψ_2 den Meßwert q_1 zu finden, ist Null.

Wenn ein "beliebiges" ψ obige Entwicklung nach den ψ_n erlaubt, nennen wir das System der Eigenzustände vollständig ($\{\psi_n\}$ "liegen dicht" im Raum der ψ) ("Basis")

eine solche Forderung ist sehr physikalisch:

Anm. $\{\psi_n\}$ sei nicht vollständig (4

$$\rightsquigarrow \exists\, \psi = \sum_n c_n \psi_n + \underset{\neq 0}{\phi} \quad \text{mit} \quad c_n = (\psi_n, \psi)$$

$$\rightsquigarrow (\psi_n, \phi) = 0 \quad \forall\, \psi_n$$

$$\rightsquigarrow (\psi,\psi) = \underset{\text{normiert}}{1} = \sum_n |c_n|^2 + \underbrace{(\phi,\phi)}_{\neq 0}$$

$$\rightsquigarrow \sum_n |c_n|^2 < 1$$, dies widerspricht unsere Interpretation (or

: die Wahrscheinlichkeit, ψ in irgendeinem Zustand zu finden, sollte 1 sein!

fordern also Vollständigkeit

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \quad \text{"Parsevalsche Gleichung"}$$

Ausgeschrieben: mit $c_n = (\psi_n, \psi)$

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n \psi_n(\vec{x}) \int \psi_n^*(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}')\, d^3x'$$

$$\overset{\text{Vertauschung}}{=} \int d^3x' \left\{ \sum_n \psi_n(\vec{x})\, \psi_n^*(\vec{x}') \right\} \psi(\vec{x}')$$

$$\rightsquigarrow \boxed{\sum_n \psi_n(\vec{x})\, \psi_n^*(\vec{x}') = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')}$$

Vollständigkeitsrelation

6.5 bei kontinuierlichem Spektrum, z.B.

a) $\vec{P}$ $\qquad \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$ $\qquad \varphi(\vec{p})$

ist Fourierentw.! $$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \underbrace{\int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}'/\hbar}\, \psi(\vec{x}')\, d^3x'}_{\varphi(\vec{p})}$$

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\vec p(\vec x-\vec x')/\hbar} = \delta^3(\vec x-\vec x')$$

Vollständigkeitsrelation

$|\varphi(\vec p)|^2$ Impulswahrscheinlichkeitsverteilung (p ersetzt diskreten Index n) (→ Übung)

Check: $(\psi, \vec P \psi) = \int d^3p\, \vec p\, |\varphi(\vec p)|^2$

... gemischtes System ... kontin. + discr.

---

b) Ortsoperator(en) $\vec X$

$$\vec X\, \psi_{\vec\lambda}(\vec x) = \vec\lambda\, \psi_{\vec\lambda}(\vec x) \qquad \text{Eigenwertgleichung}$$

$$\sim \quad \psi_{\vec\lambda}(\vec x) = \delta^3(\vec x-\vec\lambda)$$

Orthogonalität $\int d^3x\, \delta^3(\vec x-\vec\lambda)\, \delta^3(\vec x-\vec\lambda') = \delta^3(\vec\lambda-\vec\lambda')$

Vollständigkeit $\int d^3\lambda\, \delta^3(\vec x-\vec\lambda)\, \delta^3(\vec x'-\vec\lambda) = \delta^3(\vec x-\vec x')$

etwas verwirrend?! schreit nach Formalisierung (siehe später!)

Bem. Bisher ist i.a. Zustandsfunktion nicht eindeutig durch Eigenwert charakterisiert, z. B. kin. Energie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec x) = E\,\psi(\vec x) \to \psi(x) \text{ nicht eindeutig}$$

$$\psi(x) = e^{i\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\right)^{-1}\sqrt{E}\,\vec n\cdot\vec x}$$

brauche noch Impulsrichtung, also weiteren Operator! beliebige Richtung