

ERGEBNISSE VON IMPULSMESSUNGEN

Es stellt sich nun die Frage, ob man aus einer beliebigen Wellenfunktion $x \mapsto \Psi(x)$, welche im allgemeinen nicht einem Impuls-Eigenzustand entspricht, ablesen kann, mit welcher Wahrscheinlichkeit man welchen Meßwert bei einer *Impulsmessung* erhält. Der erste Schritt zur Beantwortung dieser Frage besteht darin, daß man versucht, die Wellenfunktion als Summe von Impuls-Eigenzuständen, also von Planwellen, zu schreiben. Gemäß einem mathematischen Theorem ist dies (bei „anständigen“ Funktionen) immer möglich, wenn man sich auf ein endliches Ortsintervall $x \in [-L, L]$ beschränkt:

$$\Psi(x) = \sum_{\substack{k=n\pi/L \\ n=0,\pm 1,\pm 2,\dots}} a(k) e^{ikx} \quad (7)$$

(vgl. Abb. 8). Eine solche Summe nennt man **Fourierreihe**. Allerdings ist die Summe von periodischen Funktionen wie $x \mapsto e^{ikx}$ wieder eine periodische Funktion, wenn die Wellenzahlen wie hier in einem rationalen Verhältnis zueinander stehen. Wenn die Entwicklung nach Planwellen für den ganzen Ortsraum $]-\infty, \infty[$ gültig sein soll, reicht eine Summe nicht mehr aus, und man muß $\Psi(x)$ in Form eines Integrals schreiben:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk. \quad (8)$$

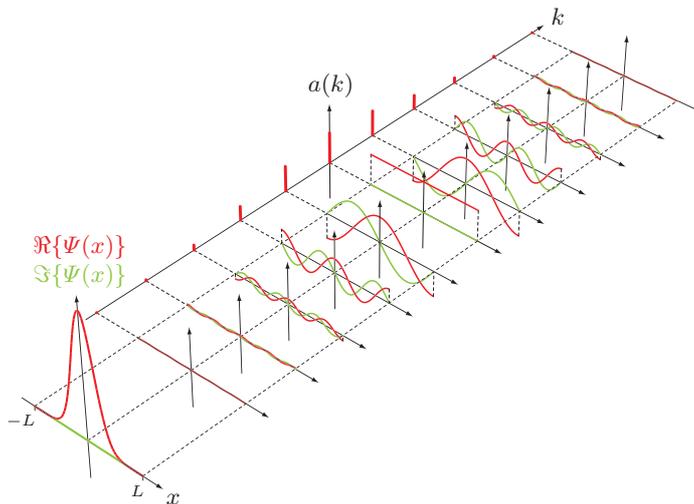


Abbildung 8: Zerlegung einer Wellenfunktion $x \mapsto \Psi(x)$ in Planwellen auf einem endlichen Intervall $[-L, L]$

Gemäß einem mathematischen Theorem existiert für alle „hinreichend anständigen“ Wellenfunktionen $x \mapsto \Psi(x)$ tatsächlich eine solche „Amplitudenverteilung“ $k \mapsto a(k)$, welche man die **Fouriertransformierte** von $x \mapsto \Psi(x)$ nennt.



Die Fouriertransformierte einer Wellenfunktion $x \mapsto \Psi(x)$ ist gegeben durch

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (9)$$

Mit Hilfe der „Amplitudenverteilung“ $k \mapsto a(k)$ kann man nun eine Funktion

$$p \mapsto \Phi(p) := \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \cdot a\left(\frac{p}{\hbar}\right), \quad (10)$$

definieren, die, wie man zeigen kann, eine anschauliche Interpretation hat: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen nach einer Impulsmessung im Impulsbereich $[p, p + dp]$ vorzufinden, ist gegeben durch $|\Phi(p)|^2 dp$. (Der Normierungsfaktor $\sqrt{2\pi/\hbar}$ garantiert, daß $\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(p)|^2 dp = 1$ gilt.)

DIE HEISENBERGSCHES UNSCHÄRFERELATION

Ist ein Teilchen nicht in einem Orts-Eigenzustand, so gibt es bei Ortsmessungen Schwankungen um einen Mittelwert; dasselbe gilt für den Impuls. Da es keine *gleichzeitigen* Eigenfunktionen des Orts und des Impulses gibt, können diese Orts- und Impulsschwankungen Δx und Δp nicht *gleichzeitig* beliebig klein sein. Bevor wir dieses Phänomen quantitativ behandeln können, müssen wir den Größen Δx und Δp einen Sinn geben.

Der *Mittelwert* aller Meßergebnisse von Ortsmessungen, d. h. der **Erwartungswert** $\langle x \rangle$ des Ortes, ist gegeben durch

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x)|^2 dx. \quad (11)$$

Das Ausmaß der *Schwankungen* der Meßwerte um diesen Mittelwert wird beschrieben durch die **Varianz**, d. h. den Erwartungswert von $(x - \langle x \rangle)^2$:

$$\text{Var}[x] := \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\Psi(x)|^2 dx. \quad (12)$$

Die Ortsunschärfe Δx ist definiert durch $\Delta x := \sqrt{\text{Var}[x]}$. Mit Hilfe der Funktion $p \mapsto \Phi(p)$ definiert man einen analogen Ausdruck für die Impulsunschärfe Δp .

Beispiel. Wir betrachten folgende Wellenfunktion (Abb. 9 links):

$$\Psi(x) := \text{const } e^{-x^2/4\sigma_x^2} e^{ik_0x},$$

wobei σ_x und k_0 reelle Konstanten sind und „const“ einen Normierungsfaktor bezeichnet. Man kann zeigen, daß $\Delta x = \sigma_x$ gilt. Die entsprechende „Impulsfunktion“ (Abb. 9 rechts) lautet

$$\Phi(p) = \text{const } e^{-(p-p_0)^2/4\sigma_p^2}$$

(vgl. Übungsaufgabe), mit $p_0 := \hbar k_0$ und $\sigma_x \sigma_p = \frac{1}{2}\hbar$. Man kann zeigen, daß $\Delta p = \sigma_p$ gilt. Somit folgt

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{13}$$

Bei einer spitzen Wellenfunktion $x \mapsto \Psi(x)$ ist die „Impulsfunktion“ $p \mapsto \Phi(p)$ breit, d. h. es gibt große Schwankungen bei Impulsmessungen. Der pathologische Grenzfall $\sigma_x \rightarrow 0$, also $\sigma_p \rightarrow \infty$, entspricht einem Eigenzustand des Ortes (Abb. 9 oben). Ist die Wellenfunktion hingegen delokalisiert, ist die „Impulsfunktion“ spitz, d. h. es gibt wenig Schwankungen bei Impulsmessungen. Der pathologische Grenzfall $\sigma_x \rightarrow \infty$, also $\sigma_p \rightarrow 0$, entspricht einem Eigenzustand des Impulses (Abb. 9 unten).

Gleichung (13) ist ein Grenzfall, der nur gilt, wenn die Wellenfunktion wie im obigen Beispiel gaußförmig ist. Für allgemeine Wellenfunktionen kann man folgende Ungleichung herleiten:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{14}$$

Das ist die Aussage der **Heisenbergschen Unschärferelation**.

2 Eigenzustände der Energie

OPERATOREN

Der Operatorenformalismus der Quantenmechanik erlaubt es, die möglichen Eigenzustände und Eigenwerte jeder beliebigen Observablen zu bestimmen. Wir werden diesen Formalismus vor allem zur Bestimmung der Energie-Eigenzustände und -Eigenwerte anwenden, da diese in der Spektroskopie eine wichtige Rolle spielen.

Jeder Observablen A wird ein sogenannter **Operator** \hat{A} zugeordnet. Operatoren transformieren eine Wellenfunktion Ψ in eine andere Wellenfunktion $\hat{A}\Psi$.

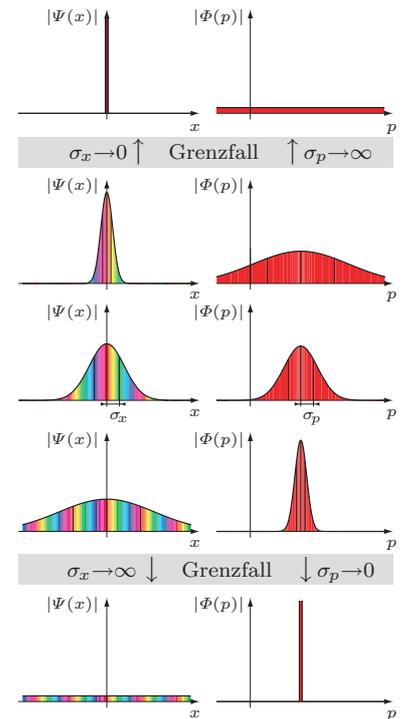


Abbildung 9: Gaußförmige Wellenfunktionen $x \mapsto \Psi(x)$ (links) und die entsprechenden „Impulsfunktionen“ $p \mapsto \Phi(p)$ (rechts). Eigenzustände des Ortes (oben) bzw. des Impulses (unten) können als pathologische Grenzfälle von Gaußschen Wellenpaketen aufgefaßt werden.

Rechenregeln für Operatoren. In der Quantenmechanik sind die Operatoren *linear*, d. h. es gilt für alle Wellenfunktionen Ψ_1 und Ψ_2 und für alle $\lambda \in \mathbb{C}$:

$$\hat{A}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{A}\Psi_1 + \hat{A}\Psi_2 \quad \text{und} \quad \hat{A}(\lambda\Psi) = \lambda\hat{A}\Psi.$$

Summe und *Produkt* zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} sind definiert durch

$$(\hat{A} + \hat{B})\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi \quad \text{und} \quad (\hat{A}\hat{B})\Psi := \hat{A}(\hat{B}\Psi).$$

Die Multiplikation von Operatoren ist nicht kommutativ, d. h. im allgemeinen gilt *nicht* $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Man beachte die Analogie mit der linearen Algebra: die Operatoren entsprechen den Matrizen, und die Wellenfunktionen entsprechen den Vektoren.

Kennt man den zu einer Observablen A gehörigen Operator \hat{A} , so kann man feststellen, ob eine gegebene Wellenfunktion Ψ einem Eigenzustand von A entspricht:

Ist ein Quantensystem in einem Eigenzustand bezüglich der Observablen A (etwa weil die Größe A soeben gemessen wurde), so wird die Wellenfunktion Ψ vom Operator \hat{A} bis auf eine multiplikative Konstante in sich selbst überführt:

$$\hat{A}\Psi(x) = A_0\Psi(x). \quad (15)$$

Die Konstante $A_0 \in \mathbb{R}$ ist der zum Eigenzustand gehörige Eigenwert, also das Resultat der Messung von A . Wellenfunktionen mit der Eigenschaft (15) nennt man **Eigenfunktionen** des Operators \hat{A} .

- Man beachte die Analogie zur linearen Algebra: Dort heißt ein Vektor v Eigenvektor einer Matrix A mit Eigenwert λ , wenn $Av = \lambda v$ gilt.
- Befindet sich das System *nicht* in einem Eigenzustand von A , so hat die Wellenfunktion $x \mapsto \hat{A}\Psi(x)$ keinerlei physikalische Bedeutung!

Man kann nun zeigen, daß der **Ortsoperator** \hat{x} durch die Multiplikation mit x gegeben ist:

$$\hat{x}\Psi(x) := x\Psi(x). \quad (16)$$

Der **Impulsoperator** hat eine etwas kompliziertere Form. Er ist gegeben durch

$$\hat{p} := \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (17)$$

Ein Eigenzustand des Impulses mit Eigenwert p_0 entspricht der durch $\Psi(x) := a e^{ip_0x/\hbar}$ definierten Wellenfunktion. Es gilt in der Tat

$$\hat{p}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} a e^{ip_0x/\hbar} = a \frac{\hbar}{i} \frac{ip_0}{\hbar} e^{ip_0x/\hbar} = p_0\Psi(x).$$

Hingegen ist etwa die Überlagerung zweier Planwellen keine Eigenfunktion des Impulsoperators:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{(a_1 e^{ip_1 x/\hbar} + a_2 e^{ip_2 x/\hbar})}_{\Psi(x)} \neq \text{const } \Psi(x) \quad \text{für } a_1, a_2 \neq 0.$$



Für die „Impulsfunktion“ $p \mapsto \Phi(p)$ gibt es einen völlig analogen Formalismus. Der Impulsoperator entspricht einem Multiplikationsoperator, also $\hat{p} = p$, und der Ortsoperator ist gegeben durch $\hat{x} := -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}$.

KOMPATIBLE UND INKOMPATIBLE OBSERVABLEN

Oft stellt sich die Frage, ob zwei verschiedene Observablen A und B *gemeinsame* Eigenzustände haben können. (Wir wissen bereits, daß dies bei den Observablen Ort und Impuls nicht der Fall ist.)

Zwei Observable A und B können nur dann gemeinsame Eigenzustände haben, wenn für die entsprechenden Operatoren

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \hat{0} \quad (18)$$

gilt.

Die Kurzschreibweise $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ heißt **Kommutator** von \hat{A} und \hat{B} . Gilt $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, so sagt man, daß die Operatoren \hat{A} und \hat{B} **vertauschen** oder **kommutieren**, und daß die Observablen A und B **kompatibel** sind. In diesem Fall können die Größen A und B gleichzeitig einen Wert haben. Man kann zeigen, daß man dann die Eigenfunktionen von \hat{A} derart wählen kann, daß sie auch Eigenfunktionen von \hat{B} sind, und umgekehrt.

Observablen, deren Operatoren nicht kommutieren, nennt man **inkompatibel**. Ein typisches Beispiel für inkompatible Größen sind Ort und Impuls; es gilt in der Tat $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ (vgl. Übungsaufgabe).

DER HAMILTONOPERATOR

Die Energie eines klassischen Teilchens setzt sich zusammen aus der kinetischen Energie E_{kin} und der in der Regel vom Ort x abhängigen potentiellen Energie $V(x)$:

$$E = E_{\text{kin}} + V(x) \quad \text{mit} \quad E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2m}p^2,$$

wobei m die Masse und v die Geschwindigkeit des Teilchens bezeichnet. Das sogenannte **Korrespondenzprinzip** besagt nun, daß man den Energieoperator dadurch erhält, indem man Ort x und Impuls p durch die entsprechenden Operatoren \hat{x} und \hat{p} ersetzt. Der zu der Größe $p^2 = p \cdot p$ gehörige Operator ist gegeben durch

$$\hat{p}^2 = \hat{p} \cdot \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Somit ist

$$\hat{H} := \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (19)$$

der gesuchte Energieoperator. Den Energieoperator nennt man **Hamiltonoperator**; deshalb schreibt man \hat{H} und nicht \hat{E} .

Der Hamiltonoperator ist unter anderem deshalb von grundlegender Bedeutung, weil aus ihm die Zeitevolution einer Wellenfunktion folgt, und zwar über die sogenannte **zeitabhängige Schrödingergleichung**:

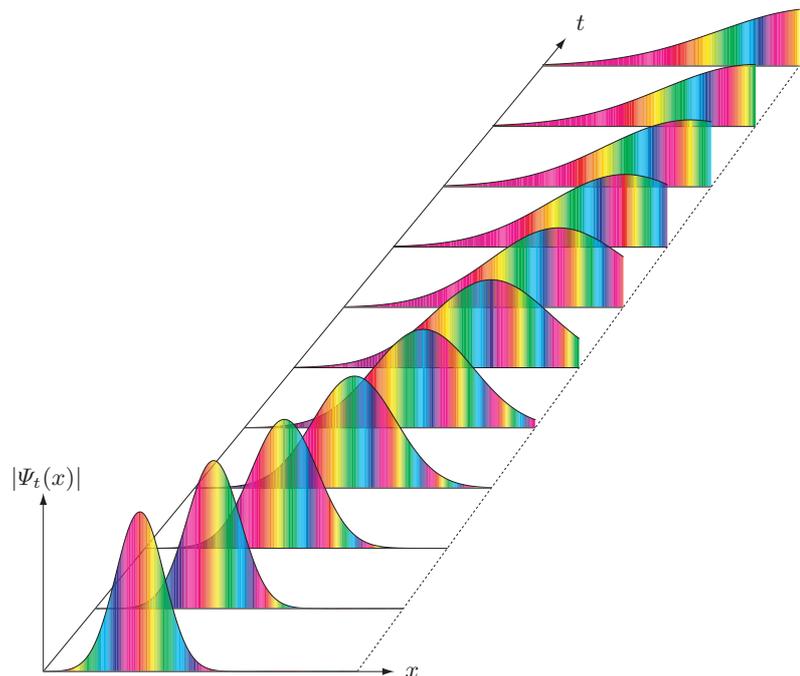


Abbildung 10: Zeitevolution eines gaußförmigen Wellenpakets im Fall konstanter potentieller Energie ($V(x) \equiv 0$). Man erkennt hier deutlich das als „Zerfließen des Wellenpakets“ bezeichnete Phänomen.