3.2. Kommutatoren, Quantisierung

[Fliessbach: 17, 31; Griffiths 3.3, 3.4, 3.5]

Wir haben im vorigen Kapitel eigentlich nur eine neue Notation für die bekannten mathematischen Strukturen der linearen Algebra eingeführt:

Quantenmechanik	Lineare Algebra
Zustände: ket-Vektoren $\vert\psi\rangle$	Vektoren $v = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$
bra-Vektoren $\langle\psi\vert$	konjugierte Vektoren $v^+ = (c_1^* \; c_2^* \cdots)$
Skalarprodukt $\langle\psi\vert\psi'\rangle$	Skalarprodukt $v^+v' = c_1^*c_1' + c_2^*c_2' + \dots$
Observablen: Operator $\hat{A}$	Matrix M
„hermitesch" $\hat{A}^+ = \hat{A}$	hermitesch $M^+ = M$
Eigenzustände $\hat{A}\vert a\rangle = a\vert a\rangle$, $a \in \mathbb{R}$	$Mv = \lambda v$, $\lambda \in \mathbb{R}$
Wellenfunktion in a-Darstellung: $\psi(a) = \langle a\vert\psi\rangle$	Elemente von v in einer Basis wobei M diagonal ist: $M = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$; $M\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$; $c_2 = (0\,1\,0\dots)\cdot v$
Matrixelemente in b-Darstellung: $A_{bb'} = \langle b\vert\hat{A}\vert b'\rangle$	Elemente von M in einer anderen Basis (in der M nicht diagonal ist).

Der einzige Unterschied ist, dass die Vektoren in der Quantenmechanik auch unendlichdimensional sein können (d.h. Funktionen).

Um jetzt Physik damit zu beschreiben, betrachten wir drei Observablen:

$\hat{x}_i$ „Ortsoperator", $i = 1,2,3$

$\hat{p}_j$ „Impulsoperator", $j = 1,2,3$

$\hat{H} := \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$ „Hamilton-Operator".

Die richtige Physik folgt von einer Verallgemeinerung der Vertauschungsrelation auf Seite 8:

$$\boxed{\text{„Quantisierung"}: \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}\,.}$$

Zeigen wir zunächst, dass dieser Formalismus zurück zur Wellenmechanik führt, falls wir die Wellenfunktion in Ortsdarstellung betrachten. Der Einfachheit halber bleiben wir in einer Dimension: $\hat{x}_i \to \hat{x}$, $\hat{p}_j \to \hat{p}$.

Eigenzustände des Ortsoperators: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$.

Normierung: $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$ [bzw. $\delta_{xx'}$ falls regularisiert]

Einheitsoperator: $\hat{1} = \int dx\, |x\rangle\langle x|$ [bzw. $\sum_x |x\rangle\langle x|$ — " —]

Wellenfunktion: $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$.

Ausgangspunkt: die Eigenwertgleichung für den Hamilton-Operator:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad \Big|\ \langle x|\cdot\ ;\ \hat{1} = \int dx'\,|x'\rangle\langle x'|$$

$$\int dx' \langle x| \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

Hier ist

$$\langle x|V(\hat{x})|x'\rangle = \langle x|\sum_n c_n(\hat{x})^n|x'\rangle = \langle x|\sum_n c_n(x')^n|x'\rangle$$
$$= \langle x|V(x')|x'\rangle = V(x')\langle x|x'\rangle = V(x)\,\delta(x-x'),$$

und

$$\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle = \int dx'' \quad \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle .$$

Um die Matrixelemente $\langle x|\hat{p}|y\rangle$ zu bestimmen, brauchen wir die grundlegende Vertauschungsrelation:

$$\langle x|[\hat{x},\hat{p}]|y\rangle = \underbrace{\langle x|\hat{x}\hat{p}|y\rangle}_{\langle x|\hat{x}|\phi\rangle} - \underbrace{\langle x|\hat{p}\hat{x}|y\rangle}_{y\langle x|\hat{p}|y\rangle} = \underbrace{\langle x|i\hbar|y\rangle}_{i\hbar\,\delta(x-y)}$$

$$\langle x|\hat{x}|\phi\rangle = \langle x|\hat{x}\phi\rangle = \langle \hat{x}^{+}x|\phi\rangle = \langle \hat{x}x|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{x}|x\rangle]^* = x\langle x|\hat{p}|y\rangle$$

$$\Longleftrightarrow \qquad (x-y)\langle x|\hat{p}|y\rangle = i\hbar\,\delta(x-y) . \qquad (*)$$

Um eine Lösung zu finden, muss man sich an die Eigenschaften der Diracschen Deltafunktion erinnern:

$$\int dx\, f(x)\, x\, \delta(x) = 0 \cdot f(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{„} x\,\delta(x) = 0 \text{"} .$$

($f(x)$: Testfunktion)

$$\int dx\, f(x)\, x \frac{d}{dx}\delta(x) = -\int dx\, \delta(x) \frac{d}{dx}\left[x f(x)\right]$$

$$= -\int dx\, \delta(x) \left[f(x) + x f'(x)\right]$$

$$= \int dx\, f(x) \left[-\delta(x)\right] - 0 \cdot f'(0)$$

$$\Rightarrow \quad \text{„} x \frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x) \text{"}$$

Also finden wir eine Lösung zur Gleichung (*):

$$\langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}\, \delta(x-y) .$$

[Zum Nachdenken: ist dies die allgemeine Lösung?]

$$\Rightarrow \quad \int dx' \langle x|\hat{p}^2|x'\rangle\, \psi(x')$$

$$= \int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle \langle x''|\hat{p}|x'\rangle\, \psi(x')$$

$$= \int dx' \int dx'' (-i\hbar)^2 \frac{d}{dx}\, \delta(x-x'') \frac{d}{dx''}\, \delta(x''-x')\, \psi(x')$$

$$= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\, \psi(x) .$$

D.h.,
$$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) .$$

Fazit: der neue Formalismus enthält die alte Schrödinger-Gleichung [zumindest zeitunabhängig, aber eigentlich auch zeitabhängig; Kapitel 3.3], aber ist <u>allgemeiner</u>: Ortsdarstellung ist nur ein Spezialfall.

Was ist die Rolle der Heisenbergschen Unschärferelation im allgemeinen Formalismus?

Satz: Seien $\hat{A}, \hat{B}$ zwei Observablen mit $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{0}$ („Nulloperator")
$\Leftrightarrow$ $\hat{A}, \hat{B}$ besitzen gleichzeitige Eigenzustände, und können daher beliebig genau gemessen werden.

„$\Leftarrow$" $[\hat{A},\hat{B}]\,|a,b\rangle = (ab - ba)\,|a,b\rangle = 0$ für jeden Zustand $|a,b\rangle$.

Wegen Vollständigkeit kann ein allgemeiner Zustand als

$|\psi\rangle = \sum_{a,b} c_{a,b}\, |a,b\rangle$ ausgedrückt werden, mit $c_{a,b} = \langle a,b|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}]\,|\psi\rangle = 0 \quad \forall \quad |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}] = \hat{0}$$

„$\Rightarrow$" Seien $|a,i\rangle$ die Eigenzustände von $\hat{A}$. Dann gilt

$$\hat{A}\hat{B}\,|a,i\rangle = \hat{B}\hat{A}\,|a,i\rangle = a\,\hat{B}\,|a,i\rangle$$

$\Rightarrow$ $\hat{B}\,|a,i\rangle$ sind Eigenzustände von $\hat{A}$ mit demselben Eigenwert

$\Rightarrow$ $\hat{B}\,|a,i\rangle = \sum_j b_{ji}\,|a,j\rangle$, wobei $b_{ji} = \langle a,j|\hat{B}|a,i\rangle$.

Also operiert $\hat{B}$ wie eine Matrix unter den $|a,i\rangle$-Zuständen. Diese Matrix kann diagonalisiert werden; damit erhalten wir Linearkombinationen, die dann Eigenzustände von $\hat{B}$ sind: $|a,b\rangle$.

Falls dagegen $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C} \neq \hat{0}$, ist eine gleichzeitige Bestimmung nicht möglich. Für einen gegebenen Zustand $|\psi\rangle$ definieren wir die Varianzen

$$(\Delta A)^2 := \langle\psi|\,(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\,|\psi\rangle$$
$$(\Delta B)^2 := \langle\psi|\,(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2\,|\psi\rangle .$$

Es gilt (Übungsblatt 9):
$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|$$

Zusammenfassung: Kommutatoren zwischen Observablen, ob verschwindend (Seite 44) oder nicht (Seite 41), spielen eine zentrale Rolle in der Quantenmechanik.