Miriam Kümmel
12. Januar 2009

EP III - Seminar

Operatoren

Statistik-Exkurs Zur Berechnung des Mittelwertes:

$$\begin{aligned} < x > &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \\ &= \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{N} x_j |G(x_j)| \\ &= \sum_{j=1}^{N} x_j \frac{|G(x_j)|}{n} \\ &= \sum_{j=1}^{N} x_j p(x_j) \end{aligned}$$

wobei $|G(x_j)|$ die Größe der Gruppe $G(x_j)$ bezeichnet, die alle x_i enthält, die den selben Wert wie x_j haben, und somit die absolute Häufigkeit von x_j bezeichnet. Damit ist $\frac{|G(x_j)|}{n}$ die relative Häufigkeit von x_j und $p(x_j) := \frac{|G(x_j)|}{n}$ die Wahrscheinlichkeit von x_j. Offensichtlich gilt $\sum_{j=1}^{N} p(x_j) = 1$. Für eine kontinuierliche Verteilungsfunktion $f(x)$ der Größe x mit $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$ gilt:

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$$

Operatoren in der Quantenmechanik Da $|\Psi(x)^2| = \Psi(x)^*\Psi(x)$ die Wahrscheinlichkeit ist, das Teilchen mit der Wellenfunktion Ψ am Ort x zu finden, ist der Erwartungwert für den Ort des Teilchens:

$$\begin{aligned} < x > &= \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x)^2|dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x\Psi(x)^*\Psi(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)^* x\Psi(x)dx \end{aligned}$$

Der Operator $\hat{A}$ zur Obervablen A, also der untersuchten physikalischen Größe, ist definiert durch

$$< A >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A}\Psi d\tau$$

Für jede physikalische Größe, die von Ort und Impuls abhängt, gibt es einen Operator.
Gilt für einen Operator $\hat{A}\Psi = A\Psi$, so ist die Funktion Ψ eine Eigenfunktion des Operators $\hat{A}$ mit dem Eigenwert A. Gibt es zu einem Eigenwert mehrere Eigenfunktionen, nennt man ihn entartet. Man kann nur die Eigenwerte messen. Die Eigenfunktionen beschreiben mögliche Zustände insoweit A betroffen ist. Die gemessenen Größen sollen reell sein. Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell und ihre Eigenfunktionen orthogonal. Daher sind die in der Quantenmechanik verwendeten Operatoren hermitesch:

$$\int \Psi_1^* \hat{A}\Psi_2 d\tau = \int \left(\hat{A}\Psi_2\right)^{ast} \Psi_1 d\tau$$

Für $\hat{A}\Psi = A\Psi$ gilt:

$$\begin{aligned}
\Delta A^2 &=< A^2 > - < A >^2 \\
&= \int \Psi^* \hat{A}^2 \Psi d\tau - \left(\int \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau \right)^2 \\
&= A \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau - \left(\int \Psi^* A \Psi d\tau \right)^2 \\
&= A^2 \underbrace{\int \Psi^* \Psi d\tau}_{=1} - \left(A \underbrace{\int \Psi^* \Psi d\tau}_{=1} \right)^2 \\
&= A^2 - A^2 = 0
\end{aligned}$$

Herleitung einiger Operatoren Die stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \Psi + E_{pot}\Psi = E\Psi$$

lässt sich auch in Operatorschreibweise schreiben: $\hat{H}\Psi = E\Psi$, wobei der Hamilton-Operator $\hat{H}$ vom Potential $E_{pot}(\vec{r})$ abhängig ist.
Der Operator für die kinetische Energie ergibt sich aus der Schrödingergleichung:

$$E_{kin}\Psi = (E - E_{pot})\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \Psi \Rightarrow \hat{E}_k in = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle$$

Mit der Wellengleichung $\Psi = Ae^{i(kr-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - E\cdot t)}$ lässt sich aus der Ableitung in kartesischen Koordinaten

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} p_x \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi \\
\frac{\partial \Psi}{\partial y} &= \frac{i}{\hbar} p_y \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial y} = p_y \Psi \\
\frac{\partial \Psi}{\partial z} &= \frac{i}{\hbar} p_z \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial z} = p_z \Psi \\
&\Rightarrow -i\hbar \bigtriangledown \Psi = \vec{p}\Psi
\end{aligned}$$

der Impulsoperator zu $\hat{p} = -i\hbar\bigtriangledown$ bestimmen. Dies ist mit dem physikalischen Zusammenhang $E_k in = \frac{p^2}{2m}$ und dem Operator der kinetischen Energie wegen $\frac{(-i\hbar\bigtriangledown=^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$ konform.
Für den Drehimpuls gilt nach der klassischen Physik $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ der Operator ist damit $\hat{L} = \vec{r} \times (-i\hbar\bigtriangledown) = -i\hbar\,(\vec{r} \times \bigtriangledown)$ bzw. in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right) \\
\hat{L}_y &= -i\hbar \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)
\end{aligned}$$

in Kugelkoordinaten gilt:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar \left(sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} + cot\vartheta cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\
\hat{L}_y &= i\hbar \left(-cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} + cot\vartheta sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

Damit ist $\hat{L}^2$ proportional zum Winkelanteil des Laplace-Operators

$$\triangle = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Das bedeutet, dass die Eigenfunktionen von $\hat{L}^2$ Kugelfunktionen sind, mit $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)$. Mit der Kenntnis dass $\frac{1}{\Theta sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(sin\vartheta\frac{\partial\Theta}{\partial\vartheta}\right) - \frac{m^2}{sin^2\vartheta} = -c_2$ und $c_2 = l(l+1)$ folgt:

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2\Psi &= \hat{L}^2 R(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)\\
&= R(r)\hat{L}^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi)\\
&= R(r)\hat{(}-\hbar^2\triangle_{\vartheta,\varphi})Y_l^m(\vartheta,\varphi)\\
&= R(r)l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi)\\
&= l(l+1)\hbar^2\Psi\\
\Rightarrow <|L|> = \sqrt{l(l+1)}\hbar^2 &
\end{aligned}$$

Und für die z-Komponente des Drehimpuls folgt mit $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$ und $\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\Psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\\
&= -i\hbar R(r)\Theta(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi}\\
&= m\hbar\Psi\\
\Rightarrow < L_z > = m\hbar &
\end{aligned}$$

Physikalische	klassische Physik	Operator
Ort $\vec{r}$	$\vec{r}$	$\vec{r}$
Impuls $\vec{p}$	$\vec{p}$	$-i\hbar\bigtriangledown$
kinetische Energie E_{kin}	$\frac{p^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$
Gesamtenergie E	$E_{kin} + E_{pot}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + E_{pot}(\vec{r})$
Drehimpuls $\vec{L}$	$\vec{r}\times\vec{p}$	$-i\hbar\left(\vec{r}\times\bigtriangledown\right)$
z-Komponente des Drehimpuls L_z		$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

Vertauschbarkeit von Operatoren Angenommen, die Funktion Ψ ist Eigenfunktion der beiden Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ mit $\hat{A}\Psi = A\Psi$ und $\hat{B}\Psi = B\Psi$, dann gilt:

$$\begin{aligned}
\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}B\Psi = B\hat{A}\Psi &= BA\Psi\\
\hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}A\Psi = A\hat{B}\Psi &= AB\Psi\\
\Rightarrow \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\Psi = 0 \Leftrightarrow \hat{A}\hat{B}\Psi &= \hat{B}\hat{A}\Psi\\
\Rightarrow \left[\hat{A},\hat{B}\right] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} &= 0
\end{aligned}$$

d.h. $\hat{A}$ und $\hat{B}$ sind vertauschbar.
Beispiel: Ortsoperator $\hat{x}$ und Impulsoperator $\hat{p}$:

$$\begin{aligned}
(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\Psi &= \left(x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)x\right)\Psi\\
&= -i\hbar x\frac{d}{dx}\Psi + i\hbar\frac{d}{dx}(x\Psi)\\
&= \underbrace{-i\hbar x\frac{d}{dx}\Psi + i\hbar x\frac{d}{dx}\Psi}_{=0} + i\hbar\Psi\underbrace{\frac{d}{dx}x}_{=1} = i\hbar\Psi\\
\Rightarrow [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar &
\end{aligned}$$

Leiteroperatoren Für den harmonischen Oszillator wird die Schrödingergleichung zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi + \frac{1}{2}\omega^2 m x^2\Psi = E\Psi$$

mit $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ und $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ folgt

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \xi^2\right)\Psi(\xi) = \varepsilon\Psi(\xi)$$

Mit dem Ansatz, der Hamilton-Operator ließe sich als Produkt zweier Operatoren darstellen $\hat{H} = b^\dagger b$, erhält man:

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi\right)}_{=b^\dagger}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi\right)}_{=b}\Psi(\xi) = \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\xi^2\right)\Psi(\xi) + \underbrace{\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial}{\partial\xi}\xi+\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\Psi(\xi)}_{=-\frac{1}{2}\left(\Psi(\xi)\frac{\partial}{\partial\xi}\xi+\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\Psi(\xi)-\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\Psi(\xi)\right)=-\frac{1}{2}\Psi(\xi)}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left(b^\dagger b+\frac{1}{2}\right)\Psi(\xi) = \varepsilon\Psi(\xi) \\
&\Rightarrow b^\dagger b\Psi(\xi) = \underbrace{\left(\varepsilon-\frac{1}{2}\right)}_{n}\Psi(\xi) && |b \\
&\Rightarrow b^\dagger b\Psi(\xi) = n\Psi(\xi) \\
&\Rightarrow b\left(b^\dagger b\Psi(\xi)\right) = b\left(n\Psi(\xi)\right) \\
&\Rightarrow bb^\dagger\left(b\Psi(\xi)\right) = n\left(b\Psi(\xi)\right) && |bb^\dagger - b^\dagger b = 1 \\
&\Rightarrow \left(1+b^\dagger b\right)\left(b\Psi(\xi)\right) = n\left(b\Psi(\xi)\right) && |-b\Psi(\xi) \\
&\Rightarrow b^\dagger b\left(b\Psi(\xi)\right) = (n-1)\left(b\Psi(\xi)\right)
\end{aligned}$$

das bedeutet, dass b den Eigenwert um Eins erniedrigt $b\Psi_n = \sqrt{n}\Psi_{n-1}$. Analog lässt sich zeigen, dass $b^\dagger$ den Eigenwert erhöht $b^\dagger\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}$.

$$\begin{aligned}
&b\Psi_0 = 0 \\
&\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi\right)\Psi_0 = 0 \\
&\Rightarrow \Psi_0 = Ce^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&\Rightarrow \Psi_n = (b^\dagger)^n\Psi_0
\end{aligned}$$

Aufgaben

1. Definieren Sie die Begriffe, Operator, Erwartungswert, Messwert, Eigenwert und Eigenfunktion. (Skript)
2. Was bezeichnet die Aussage, dass zwei Operatoren kommutieren? (Skript)
3. Anwesenheitsaufgaben vom 24.11.
4. Anwesenheitsaufgaben vom 01.12.
5. Blatt 7, Aufgabe 16
6. Blatt 8, Aufgabe 18
7. Blatt 9, Aufgabe 21
8. Man leite aus den Relationen zwischen kartesischen Koordinaten und Kugelkoordinaten die Darstellungen der x- y- und z-Komponente des Drehimpulsoperators in Kugelkoordinaten und $\hat{L}^2 = -\hbar\left(\frac{1}{sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\right)sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$ her. (Demtröder)
9. S.110 Beispiel 2.9 (Alonso/Finn)
10. S.110 Beispiel 2.10 (Alonso/Finn)
11. Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion für freie Teilchen $\Psi(x) = e^{\pm ikx}$ Eigenfunktionen des Impulsoperators sind, die zu den Eigenwerten $\pm\hbar k$ gehören. (Alonso/Finn)
12. Geben Sie an, welche der folgenden Funktionen Eigenfunktionen des Operators $\frac{d}{dx}$ sind: (a) e^{ikx}, (b) e^{a^x}, (c) $sinkx$. Geben Sie jeweils den Eigenwert an. Führen Sie die gleiche Betrachtung für den Operator $\frac{d^2}{dx^2}$ durch. (Alonso/Finn)
13. Zeigen Sie, dass der Impulsoperator hermitesch ist. (Hinweis: Integrieren Sie den Ausdruck auf der linken Seite von $\int\Psi_1^*\hat{A}\Psi_2 d\tau = \int\left(\hat{A}\Psi_2\right)^{ast}\Psi_1 d\tau$ partiell mit $\hat{A}$ als Impulsoperator, und berücksichtigen Sie das Verhalten der Wellenfunktionen bei $\pm\infty$)(Alonso/Finn)
14. Bestimmen Sie die Mittel- oder Erwartungswerte von x, x^2, p und p^2 für die Zustände $n = 0$ und $n = 1$ des linearen harmonischen Oszillators. (Alonso/Finn)

Literatur

- Skript S. 79-88
- Demtröder S. 137-142
- Alonso/Finn S. 104-101