Gleichzeitige Eigenfunktionen von Operatoren

- Eine Observable F hat den scharfen Wert F_0 wenn der Zustand des Teilchens ψ die Eigenwertgleichung

$$\hat{F}\,\psi = F_0\,\psi$$

erfüllt.

Gibt es Zustände ψ, die gleichzeitig Eigenfunktionen verschiedener Operatoren sind?

- Es gibt Zustände ψ bei denen die Erwartungswerte verschiedener Observable gleichzeitig scharf sind.
  - Beispiele:
    - Energie E und Impuls $\vec{p}$
    - Energie E und Drehimpuls $\vec{L}$
    - Ortskoordinate x und orthogonaler Impuls p_y
    - orthogonale Impulskomponenten p_x und p_y
  - explizites Beispiel: Teilchen in 1D im räumlich und zeitlich konstantem Potential V

$$\psi(x,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$\Rightarrow$ ψ ist gleichzeitig Eigenfunktion von $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ und $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

- Allgemein gilt:

Zwei Observable F und G eines Teilchens im Zustand Ψ sind dann und nur dann gleichzeitig scharf, wenn die Anwendung des Kommutators von $\hat{F}$ und $\hat{G}$ auf die Wellenfunktion Ψ null ergibt

$$\boxed{[\hat{F}, \hat{G}]\,\Psi = 0}$$

=> folgt mit $\hat{F}\Psi = F_0\Psi$ und $\hat{G}\Psi = G_0\Psi$

- <u>Beispiele</u>:
  - $[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0$
  - $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$
  - $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \neq 0$ Komponenten des Drehimpuls kommutieren nicht.
  - $[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, L_z] = 0$ beim Wasserstoff-Atom

Orthogonalität von Eigenfunktionen

$\hat{F}\psi_m = F_m \psi_m$
$\hat{F}\psi_n = F_n \psi_n$

ψ_m und ψ_n seien Eigenfunktionen eines Hermite'schen Operators $\hat{F}$, die zu den verschiedenen Eigenwerten F_m und F_n gehören. Dann sind ψ_m und ψ_n im ihrem räumlichen Existenzgebiet orthogonal, d.h.

$$\boxed{\int \psi_m^* \psi_n \, dx = 0} \quad \text{für } m \neq n$$

mathematische Definition der Orthogonalität zweier Funktionen

Beispiel: - Wellenfunktionen ψ_n zu Energieeigenwerten E_n beim Teilchen im Potentialtopf

Begründung: - ist Konsequenz der Hermitizität von $\hat{F}$

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dx = \int \psi \hat{F}^* \psi^* \, dx$$

- ebenfalls gilt für unterschiedliche Wellenfunktionen ψ_a, ψ_b

$$\int \psi_a^* \hat{F} \psi_b \, dx = \int \psi_a \hat{F}^* \psi_b^* \, dx$$

- mit $\hat{F}\psi_m = F_m \psi_m$ und
$\hat{F}\psi_n = F_n \psi_n$ folgt

$$\boxed{\int \psi_m^* \psi_n \, dx = 0}$$

Entartung

- Häufig gehören mehrere verschiedene Eigenfunktionen zum selben Eigenwert F_n eines Operators $\hat{F}$. Dieser Fall wird <u>Entartung</u> genannt.

- Eigenfunktionen, die zum selben Eigenwert gehören sind nicht notwendigerweise orthogonal.

- Beispiel: Teilchen im einem 2D oder 3D Potentialtopf.

  $\Rightarrow$ mehrere Eigenfunktionen des Hamilton-Operators haben identische Energie-Eigenwerte, sind also entartet

Linearkombinationen von Eigenfunktionen

- Eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators $\hat{F}$ zum selben Eigenwert F_0 ist wieder eine Eigenfunktion des Operators $\hat{F}$ zum selben Eigenwert F_0.

Sei: $\hat{F}\psi_1 = F_0 \psi_1$

$\hat{F}\psi_2 = F_0 \psi_2$

so gilt

$$\hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = F_0(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)$$

- Diese Tatsache erlaubt es z.B. aus zwei nicht notwendigerweise orthogonalen Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2 eines Operators $\hat{F}$ zwei neue orthogonale Eigenfunktionen zu kombinieren.

$\int \psi_1^* \psi_2 \, dx \neq 0$

mit

$\hat{F}\psi_1 = F_1\psi_1$

$F\psi_2 = F_1\psi_2$

z.B. $$\Psi_1 = \psi_1$$

$$\Psi_2 = \frac{\psi_2 - \psi_1 \int \psi_1^* \psi_2 \, dx}{\sqrt{1 - \left|\int \psi_1^* \psi_2 \, dx\right|}}$$

Linearkombinationen von Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten.

- Eine Eigenfunktion eines Operators $\hat{F}$ stellt einen Zustand dar in welchem die Observable F einen scharfen Erwartungswert hat. Fragestellung:
- Welche physikalische Bedeutung hat ein Zustand, der eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators $\hat{F}$ zu verschiedenen Eigenwerten ist?

Beispiel: - Betrachte Eigenfunktionen des Hamiltonoperators $\hat{H}$ für ein Teilchen im Potentialtopf.

$$\Psi_n(x) = u_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

mit $\quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$

und $\quad u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n x \pi}{a}\right)$

- und die Linearkombination

$$\Psi = c_1 u_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + c_2 u_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} + \dots + c_n u_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

- Jeder Summand ist Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.
- Ψ ist ebenfalls eine Lösung: Superposition.

- $\Psi^* \Psi$ ist explizit zeitabhängig, daher ist Ψ kein stationärer Zustand.

Allgemeine Betrachtung

- Betrachte Observable F deren Operator $\hat{F}$ die zu den Eigenwerten $F_1, F_2, \ldots, F_i$ gehörenden Eigenfunktionen $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_i$ besitzt, so dass die Eigenwertgleichungen $\hat{F}\psi_i = F_i \psi_i$ gelten.
- Berechne den Erwartungswert $\langle F \rangle$ für den allg. Superpositionszustand $\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_i\psi_i$

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx$$

$$= \int (c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* + \ldots + c_i^*\psi_i^*)(c_1 F_1 \psi_1 + c_2 F_2 \psi_2 + \ldots + c_i F_i \psi_i)$$

$$= c_1^* c_1 F_1 + c_2^* c_2 F_2 + \ldots + c_i^* c_i F_i$$

da $\int \psi_n^* \psi_m \, dx = \delta_{nm}$ (ψ_n sind normiert und orthogonal)

- Interpretation: - Einzelne Messungen der Observablen F im Zustand Ψ ergeben Messwerte F_i mit Wahrscheinlichkeit

$$W_i = c_i^* c_i$$

$\Rightarrow$ 3. Postulat!

- Für den Erwartungswert $\langle F \rangle$ gilt

$$\langle F \rangle = w_1 F_1 + w_2 F_2 + \ldots + w_i F_i$$

welches gerade dem Mittelwert von F entspricht.

Entwicklung nach Eigenfunktionen

Alle Eigenfunktionen ψ_i eines Hermite'schen Operators $\hat{F}$ bilden ein orthogonales Funktionensystem. Ist dieses System vollständig, so lässt sich jeder Zustand Ψ eines quantenmechanischen Systems als Linearkombination dieser Eigenfunktionen ψ_i schreiben.

⇒ diese wird dann als Entwicklung der Wellenfunktion Ψ nach den Eigenfunktionen des Operators $\hat{F}$ bezeichnet

↳ erlaubt die Wahrscheinlichkeiten $w_i = c_i^* c_i$ der möglichen Messwerte F_i der Observablen F zu bestimmen.