14. Operatoren und Eigenfunktionen

14.1. Motivation

Die Schrödingergleichung (eine Darstellung)

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ mit

$\hat{H}$ = Hamilton-(Energie-)Operator

E = (Energie-)Eigenwert

Ψ= Eigenfunktion

sieht bekannt aus (?), wenn wir umformen

$\hat{H}\Psi - E\Psi = 0 \rightarrow (\hat{H} - E)\Psi = 0$ nämlich wie die zum Auffinden von Eigenwerten und –vektoren benutzte Matrixgleichung

14.2. Operatoren

Physikalische Größen werden in der Quantenmechanik durch Operatoren beschrieben. Man ersetzt in den Gleichungen der klassischen Mechanik Größen wie Ort, Impuls, Energie etc. durch die entsprechenden Operatoren (Korrespondenzprinzip).

Def.: Ein Operator $\hat{A}$ ist eine Vorschrift, die einem Element ϕ eines Raumes eindeutig ein anderes Element ψ dieses Raumes zuordnet. Man schreibt: $\hat{A}\phi = \psi$

Die wichtigsten physikalischen Größen („Observable“) und die ihnen entsprechenden Operatoren sind:

	klassisch	quantenmechanisch
Ort		
Impuls		
kin. Energie		
Drehimpuls		

Def.: Unter einem Kommutator oder der Vertauschungsklammer versteht man folgende Rechenvorschrift für Operatoren:

(Heisenbergsche Vertauschungsrelation)

In den Beispielen 1 und 2 sagt man, die Operatoren sind vertauschbar, in Beispiel 3 sind sie nicht vertauschbar.

Satz: Die zu nichtvertauschbaren Operatoren gehörenden physikalischen Größen sind nicht mit beliebiger Genauigkeit gemeinsam messbar (Heisenbergsche Unschärferelation).

Hier also Impuls und Ort, Gleiches gilt für Energie und Zeit.

14.3. Eigenwerte und Eigenfunktionen

Annahme: Die Eigenwertgleichung

$\hat{A}\Phi_n = a_n\Phi_n$ für den hermiteschen Operator $\hat{A}$ besitze zu gewissen Zahlen, den Eigenwerten a_n, quadratisch integrierbare Lösungen Φ_n, die Eigenfunktionen, die so gewählt werden können, dass

Def.: Ein Operator $\hat{A}$ heißt hermitesch („symmetrisch"), wenn für ihn gilt

Anmerkung 1: Ψ^* ist die zu Ψ konjugiert komplexe Funktion (i durch –i ersetzen)

Anmerkung 2: Orts-, Impuls-, Energie- und Drehimpulsoperatoren sind hermitesch

weitere Annahme: zu jedem Eigenwert a_n existiere nur eine Eigenfunktion Φ_n

Dann gilt der

Satz:

1. die Eigenwerte a_n sind reell
2. für $\hat{A}$ gilt:
3. Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten eines hermiteschen Operators sind orthogonal zueinander, d.h. es gilt:

Bedeutung der Eigenwerte a_n: die möglichen Messwerte für eine Messung einer Observablen A an einem einzelnen Teilchen der quantenmechanischen Gesamtheit sind die Eigenwerte a_n.

Bei der Frage nach diskreten <u>Energiewerten</u> eines physikalischen Systems ist die Eigenwertgleichung für den zugehörigen Hamiltonoperator, die sogenannte zeitunabhängige <u>Schrödingergleichung</u>

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$ zu untersuchen.

Der Rechenweg ist immer der gleiche:

1. Eigenwertgleichung aufstellen (meistens die Schrödingergleichung)
2. Eigenfunktionen suchen
3. Eigenwerte zu diesen Funktionen suchen

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_n(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_n(x) = E_n\psi_n(x).$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$