

I. Formulierung der Quantenmechanik

Teil 1

1.1 Quantenmechanischer Zustand und Hilbertraum

Postulat 1 Der Zustand eines physikalischen Systems wird bis auf einen komplexen Vorfaktor vom Betrag 1 durch einen normierten Vektor $|\varphi\rangle$ in einem Hilbertraum beschrieben.

Hilbertraum: Menge $\mathcal{H}$ von Elementen $|f\rangle, |g\rangle, \dots$
Vektoren genannt mit folgenden Eigenschaften

Axiom 1 $\mathcal{H}$ ist linearer Raum über den komplexen Zahlen $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$
 $|f\rangle, |g\rangle, |h\rangle, \dots \in \mathcal{H}$

$$(i) \quad |f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow \alpha(|f\rangle + |g\rangle) = \alpha|f\rangle + \alpha|g\rangle \in \mathcal{H}$$

$$(ii) \quad (\alpha + \beta)|f\rangle = \alpha|f\rangle + \beta|f\rangle \in \mathcal{H}$$

$$(iii) \quad \alpha(\beta|f\rangle) = (\alpha\beta)|f\rangle \in \mathcal{H}$$

$$(iv) \quad 1|f\rangle = |f\rangle$$

$$(v) \quad 0|f\rangle = |0\rangle_v$$

Nullvektor

$$(vi) \quad |f\rangle + |0\rangle_v = |f\rangle$$

$$(vii) \quad \alpha|0\rangle_v = |0\rangle_v$$

Axiom 2: $\exists$ ein positiv definites Skalarprodukt

$$|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow (|f\rangle \cdot |g\rangle) = \underline{\langle f|g \rangle} \in \mathbb{C}$$

$\mathbb{C}$ Notation

$$(18) \quad \boxed{\langle f|g \rangle = \langle g|f \rangle^* \in \mathbb{C}}$$

Folgerung

$$\langle f|f \rangle = \langle f|f \rangle^* > 0 \quad \text{falls } |f\rangle \neq |0\rangle_v$$

Norm

$$\| |f\rangle \| = \sqrt{\langle f|f \rangle} > 0 \quad \text{falls } |f\rangle \neq |0\rangle_v$$

"Bra" und "Ket" Vektoren (von bracket eng). "Klammer")

Das Skalarprodukt Gl. (18) kann als lineare Abbildung in die komplexen Zahlen $\mathbb{C}$ verstanden werden. Damit ist die Menge aller "bra" Vektoren

$$\langle g|$$

die Menge aller linearen Abbildungen der Vektoren $|f\rangle$ in die komplexen Zahlen

$$(19) \quad \langle g | : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$$

da für jedes $|f\rangle \in \mathcal{H} : \quad \langle g|f\rangle = c \in \mathbb{C}$

Def: Ein Hilbertraum wird separabel genannt, wenn es eine abzählbare vollständige Orthonormalbasis gibt

$$n \in \mathbb{N} : \quad \{ |\phi_n\rangle \} \in \mathcal{H} \quad \langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\forall |f\rangle \in \mathcal{H} \quad |f\rangle = \sum_n \langle \phi_n | f \rangle |\phi_n\rangle$$

Hat die Basis endlich viele Elemente, so heißt $\mathcal{H}$ endlich dimensional und die Anzahl der orthonormalen Basisvektoren definiert die Dimension von $\mathcal{H}$

Beispiele für separable Hilberträume

$$(i) \quad \mathbb{C}^n \quad n \in \mathbb{N} \quad c_1, c_2, \dots, c_n$$

$$\underbrace{(c_1, c_2, c_3, \dots, c_n)}_{n\text{-Tupel}} \cdot \underbrace{(d_1, d_2, \dots, d_n)}_{n\text{-Tupel}} = \sum_{j=1}^n c_j^* \cdot d_j$$

(ii) $L^{(2)}(\mathbb{R}^3)$ Raum der in $\mathbb{R}^3$ komplexwertigen, quadratintegrierbaren Funktionen

$$\int d\vec{x} |f(\vec{x})|^2 < \infty$$

$$f \cdot g = \langle f | g \rangle = \int d^3x f^*(x) g(x)$$

1.2 Observablen in der Quantenmechanik

Wir hatten argumentiert, daß $|\psi(x)|^2$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Ort ist. Dann sollte für den Erwartungswert bei einer Ortsmessung gelten

$$\begin{aligned} E(x) &= \int dx \, x |\psi(x)|^2 \equiv \langle \hat{x} \rangle \\ (20) \quad &= \int dx \, \psi^*(x) x \psi(x) = \int dx \, \psi^*(x) \phi(x) \\ &= \langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{x} \psi \rangle \end{aligned}$$

wobei $\phi(x) = x \psi(x)$ ist, d.h. eine Wellenfunktion / Zustand der aus $\psi(x)$ entsteht durch Multiplikation ("Anwendung") mit x ("von x "). Wir haben auch argumentiert, daß der Impuls eines Teilchens durch $p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ dargestellt werden kann, d.h. wir erwarten für den Erwartungswert einer Impulsmessung so etwas wie

$$E(p) = \langle \hat{p} \rangle = \int dx \, \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$(27) = \int dx \psi^*(x) \tilde{\phi}(x) = \langle \psi | \tilde{\phi} \rangle = \langle \psi | \hat{P} \psi \rangle$$

Wobei $\tilde{\phi}(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$ wiederum ein Zustand ist, der aus ψ durch Anwendung eines linearen Operators entsteht

Observable = lineare Operatoren

$$\hat{X}|\psi\rangle = |\phi\rangle = |\hat{X}\psi\rangle$$

$$\hat{P}|\psi\rangle = |\tilde{\phi}\rangle = |\hat{P}\psi\rangle$$

Postulat 2: Jeder Observable (meßbare Größe) eines quantenmechanischen Systems entspricht ein selbstadjungierter linearer Operator. Die möglichen Meßwerte der Observablen entsprechen den Eigenwerten des Operators.

ein paar Definitionen

Def: $\hat{A}$ heißt linearer Operator in $\mathcal{H}$ falls gilt

$$\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \text{oder} \quad \hat{A}: D_A \rightarrow W_A \subseteq \mathcal{H}$$

$$\begin{aligned} \hat{A}(\alpha|f\rangle + \beta|g\rangle) &= \alpha\hat{A}|f\rangle + \beta\hat{A}|g\rangle \\ &= \alpha|\hat{A}f\rangle + \beta|\hat{A}g\rangle \end{aligned}$$

Def: Norm von $\hat{A}$

$$\|\hat{A}\| = \sup_{|f\rangle \neq |0\rangle} \frac{\|\hat{A}|f\rangle\|}{\| |f\rangle \|}$$

falls $\|\hat{A}\| < \infty$ heißt $\hat{A}$ beschränkt

Ab jetzt betrachten wir, falls nicht anders vermerkt, beschränkte lineare Operatoren, kurz "Operatoren"

Def: zu $\hat{A}$ (hermitesch) adjungierter Operator $\hat{A}^+$

$$\hat{A}: D_A \rightarrow W_A$$

$$\hat{A}^+: D_{A^+} \rightarrow W_{A^+}$$

Def.-Bereich Wertebereich

$$i.A. D_A, W_A \subseteq \mathcal{H}$$

$$(22) \quad \boxed{\langle f | \hat{A} g \rangle = \langle \hat{A}^+ f | g \rangle} \quad \forall |f\rangle \in D_{A^+} \text{ und } |g\rangle \in D_A$$

Def: $\hat{A}$ heißt hermitesch falls gilt

$$(23) \quad \boxed{\hat{A}^+ = \hat{A}}$$

auf Durchschnittsmenge
der Definitionsbereiche
 D_A, D_{A^+}

Def: $\hat{A}$ heißt darüberhinaus selbstadjungiert falls gilt

$$(24) \quad \boxed{\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad \text{und} \quad D_A = D_{A^\dagger} = \mathcal{D}}$$

Bem.: In unendlich dimensionalen Hilberträumen sind "hermitesch" und "selbstadjungiert" nicht mehr dasselbe!

Beispiel: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \langle g| = (u, v)$$

$$\langle g|f\rangle = (u^*, v^*) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = u^*x + v^*y$$

hier sind lineare Operatoren 2×2 Matrizen (bilden $|f\rangle$ auf $|f'\rangle$ ab)

Sei nun

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \quad \text{mit } a, c \text{ reell}$$

$$A^\dagger = (A^T)^* = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & c \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$$

A ist selbstadjungiert, denn

$$\begin{aligned}
\langle f | A g \rangle &= (f_1^*, f_2^*) \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} \\
&= (f_1^*, f_2^*) \begin{pmatrix} a g_1 + b g_2 \\ b^* g_1 + c g_2 \end{pmatrix} \\
&= \underline{a f_1^* g_1} + \underline{b f_1^* g_2} + \underline{b^* f_2^* g_1} + \underline{c f_2^* g_2}
\end{aligned}$$

andererseits ist

$$|A^\dagger f\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a f_1 + b f_2 \\ b^* f_1 + c f_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle A^\dagger f | = (a f_1^* + b^* f_2^*, b f_1^* + c f_2^*)$$

$$\langle A^\dagger f | g \rangle = (a f_1^* + b^* f_2^*, b f_1^* + c f_2^*) \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}$$

$$= \underline{a f_1^* g_1} + \underline{b^* f_2^* g_1} + \underline{b f_1^* g_2} + \underline{c f_2^* g_2}$$

$$= \langle f | A g \rangle \quad \text{und} \quad A^\dagger = A$$

Def: Ein Zustand $|\lambda\rangle$ heißt Eigenvektor EV von $\hat{A}$ falls gilt

$$(25) \quad \boxed{\hat{A} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle}$$

λ heißt Eigenwert EW

Bem.: genauer Rechtseigenvektor und -eigenwert

Wichtige Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren

Sei $\hat{A}$ ein selbstadjungierter Operator, dann gilt:

$$(i) \quad \langle f | \hat{A} | f \rangle = \langle f | \hat{A} f \rangle = \langle \hat{A} f | f \rangle$$

ist reell

$$(ii) \quad \text{die Eigenwerte von } \hat{A} \text{ sind reell, d.h.}$$
$$\hat{A} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

$$(iii) \quad \text{Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal}$$
$$\hat{A} |\lambda_1\rangle = \lambda_1 |\lambda_1\rangle \quad \hat{A} |\lambda_2\rangle = \lambda_2 |\lambda_2\rangle$$
$$\Rightarrow \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle = 0 \quad \text{falls } \lambda_1 \neq \lambda_2$$

$$(iv) \quad \text{aus den Eigenvektoren von } \hat{A} \text{ kann ein vollständiger Satz von orthonormierten Basisvektoren konstruiert werden}$$

Bem.: Für hermitesche aber nicht selbstadjungierte Operatoren ($D_A, D_{A^\dagger} \neq \mathbb{I}$) gilt (iv) z.B. nicht mehr

elementare Folgerung $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ selbstadjungiert

$\exists V: |a_n\rangle$, d.h. $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$

dann gilt:

(i) für jeden Zustand $|f\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$(26) \quad |f\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle \quad c_n = \langle a_n | f \rangle$$

(ii) für jeden Operator $\hat{B}$ gilt

$$\begin{aligned} \hat{B}|f\rangle &= \sum_n \langle a_n | \hat{B} |f\rangle \cdot |a_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle a_n | \hat{B} |a_m\rangle \cdot c_m |a_n\rangle \end{aligned}$$

d.h. es besteht ein eindeutiger Zusammenhang

$$(27) \quad \boxed{\hat{B} \leftrightarrow B_{nm} \equiv \langle a_n | \hat{B} |a_m\rangle}$$

D.h. jeder Operator in einem separablen Hilbertraum kann als unendlich oder endlich-dimensionale Matrix aufgefasst werden

Darüberhinaus erlaubt Gl. (25) Funktionen von Operatoren zu berechnen

$$\text{Sei } \hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$$

$$(28) \quad f(\hat{A}) |a_n\rangle = f(a_n) |a_n\rangle$$

Hierbei ist $f(\hat{A})$ im Sinne einer Potenzreihenentwicklung zu verstehen, d.h.

$$(29) \quad f(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2 + \dots$$

$$\Rightarrow f(\hat{A}) = \alpha + \beta \hat{A} + \gamma \hat{A}^2 + \dots$$

und $\hat{A}^2 = \hat{A} \hat{A}$ die Hintereinanderausführung bedeutet,

$$\begin{aligned} f(\hat{A}) |a_n\rangle &= (\alpha + \beta \hat{A} + \gamma \hat{A}^2 + \dots) |a_n\rangle \\ &= \alpha |a_n\rangle + \beta a_n |a_n\rangle + \gamma a_n \underbrace{\hat{A} |a_n\rangle}_{= a_n |a_n\rangle} + \dots \\ &= (\alpha + \beta a_n + \gamma a_n^2 + \dots) |a_n\rangle \quad \square \end{aligned}$$

Gl. (28) kann eleganter durch orthogonale Projektoren ausgedrückt werden!

Def.: Ein selbstadjungierter Operator $\hat{P}$ heißt orthogonaler Projektor (kurz Projektor) falls gilt

$$(30) \quad \boxed{\hat{P}^2 = \hat{P}}$$

Man nennt $\hat{Q} = \mathbb{1} - \hat{P}$ den komplementären Projektor

- Die Eigenwerte des Projektors sind 0 oder 1

$$\hat{P}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad \hat{P}^2|\lambda\rangle = \hat{P}\hat{P}|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle$$

$$\lambda^2 = \lambda \Rightarrow \lambda \in \{0, 1\}$$

Gibt es nur einen Eigenzustand zum Eigenwert 1 heißt $\hat{P}$ eindimensional

Für selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}$ gilt

$$(31) \quad \boxed{f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) \hat{P}_n}$$

Spektraldarstellung von $f(\hat{A})$

Hierbei ist $\hat{P}_n$ eindimensionaler Projektor auf $|a_n\rangle$

$$(32) \quad \hat{P}_n = |a_n\rangle\langle a_n|$$

Def: inverser Operator $\hat{A}^{-1}$ zu $\hat{A}$

$$(33) \quad \hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \hat{A} = \mathbb{1}$$

Def: Ein beschränkter auf ganz $\mathcal{H}$ definierter Operator $\hat{U}$ heißt unitär falls der Wertebereich von $\hat{U}$ ganz $\mathcal{H}$ ist und $\hat{U}^{-1}$ existiert

$$(34) \quad \boxed{\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger} \quad \text{gilt}$$

Unitäre Operatoren haben eine Reihe wichtiger Eigenschaften

$$(35) \quad (\hat{U}|f\rangle) \cdot (\hat{U}|g\rangle) = \langle \hat{U}^\dagger f | \hat{U} g \rangle = \langle f | g \rangle$$
$$\forall |f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H}$$

d.h. die Anwendung unitärer Operatoren auf Vektoren in $\mathcal{H}$, unitäre Transformationen genannt,

$$(36) \quad |f\rangle \longrightarrow \hat{U}|f\rangle$$

lässt Skalarprodukte invariant, $\mathbb{P}$

Im Gegensatz zur Multiplikation mit komplexen

Zahlen ist die Hintereinanderausführung von Operatoren nicht immer vertauschbar ($\rightarrow$ lineare Algebra von Matrizen)

Def: Der Kommutator zweier Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ist definiert als

$$(37) \quad \boxed{[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

(Er ist ein Operator auf $D_{AB} \cap D_{BA}$)

Man sagt zwei Operatoren kommutieren, falls

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Bspl: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ Pauli Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_\mu^\dagger = \sigma_\mu \quad \text{d.h. alle sind hermitesch}$$

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \sigma_z$$

$$\sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \sigma_z$$

d.h.

$$(38) \quad [\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z \neq 0 \quad \left(\begin{array}{l} \text{das selbe} \\ \text{gilt zyklisch} \end{array} \right)$$

man $\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

offensichtlich gilt

$$(39) \quad [\sigma_x, \sigma^2] = [\sigma_y, \sigma^2] = [\sigma_z, \sigma^2] = 0$$

Zwei miteinander kommutierende Operatoren haben folgende wichtige Eigenschaft:

Satz: Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ selbstadjungiert mit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ (auf ganz $\mathcal{H}$). Dann existiert ein gemeinsamer, vollständiger Satz von Eigenvektoren von $\hat{A}$ und $\hat{B}$

Bem.: es "existiert" heißt nicht, daß jeder Satz von EV ein gemeinsamer ist! Außerdem sind die EW von $\hat{A}$ und $\hat{B}$ i.A. verschieden!

Def.: Es sei $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots)$ ein Satz kommutierender Operatoren. Falls zu jedem verschiedenen Satz von Eigenwerten $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots \neq \mathbb{1})$

$$\underline{\lambda} = (a_n, b_n, c_n, \dots)$$

nur ein gemeinsamer EV $|\underline{\lambda}\rangle$ existiert

Nennt man den Satz von Operatoren einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren

Satz: Ein Operator $\hat{O}$ der mit jedem Operator $\hat{A}, \hat{B}, \dots$ eines vollständigen Satzes kommutierender Operatoren kommutiert, läßt sich als Funktion dieser Operatoren darstellen.

Bspl: $G_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\lambda = +1$ $|\lambda_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
 $\lambda = -1$ $|\lambda_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

ist ein vollständiger Satz kommutierender
Operatoren in $\mathbb{C}^2$ (ein sehr minimalistisches
Beispiel 😊)

Betrachten $G_g^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

es gilt offensichtlich $[\sigma_y^2, \sigma_x] = 0$

d.h. $\sigma_y^2 = f(\sigma_x)$

in der Tat findet man $f(\mathcal{O}_X) = \mathcal{O}_X^2$