

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)

$$\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* \in \mathbb{C}$$

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 engl. "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

$$\int d^3x |f(\vec{x})|^2 < \infty$$

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

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

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

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 $\tilde{\phi}(x) = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$ 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 $\hat{A}$

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

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

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

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

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

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

Bem.: In endlich 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

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

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)

$$\hat{P}^2 = \hat{P}$$

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)

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

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

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

(32)

$$\hat{P}_n = |a_n\rangle\langle a_n|$$

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

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

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, $\parallel$

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

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

(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.

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

nun $\hat{G}^2 = \hat{G}_x^2 + \hat{G}_y^2 + \hat{G}_z^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

offensichtlich gilt

$$(39) \quad [\hat{G}_x, \hat{G}^2] = [\hat{G}_y, \hat{G}^2] = [\hat{G}_z, \hat{G}^2] = 0$$

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

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

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

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

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

in der Tat findet man $f(\sigma_x) = \sigma_x^2$

Satz gemeinsamer Eigenvektoren

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

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

$$\hat{A} \hat{B} |a_n\rangle = \hat{B} \hat{A} |a_n\rangle = a_n \hat{B} |a_n\rangle$$

$\Rightarrow \hat{B} |a_n\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{A}$
zum EW a_n

- falls $\hat{A}$ nichtentartetes Spektrum hat

$$\Rightarrow \hat{B} |a_n\rangle \sim |a_n\rangle, \text{ d.h. } \hat{B} |a_n\rangle = b_n |a_n\rangle$$

□

- falls $\hat{A}$ entartetes Spektrum hat

$$a_n \rightarrow \{|a_{n1}\rangle, |a_{n2}\rangle, \dots, |a_{ne}\rangle\}$$

$\Rightarrow$ wie oben aber

$$\hat{B} |a_{nj}\rangle = \sum_{s=1}^e c_{js}^{(n)} |a_{ns}\rangle$$

Die Koeffizienten $\{c_{js}^{(n)}\}$ sind eine selbstadjungierte $e \times e$ Matrix und kann diagonalisiert werden

$$|\tilde{a}_{nj}\rangle = \sum_{s=1}^e \eta_s^{(j)} |a_{ns}\rangle$$

$$\text{und } \hat{A} |\tilde{a}_{nj}\rangle = a_n |\tilde{a}_{nj}\rangle \quad \hat{B} |\tilde{a}_{nj}\rangle = b_{nj} |\tilde{a}_{nj}\rangle$$

wobei b_{nj} Eigenwert der $e \times e$ Matrix $c_{js}^{(n)}$ sind □

1.3 Fundamentale Operatoren in der Quantenmechanik

Aus der klassischen Mechanik wissen wir, daß die fundamentalen Variablen kanonische Koordinaten und Impulse sind

$$q_j, p_j$$

wobei gilt $\{\cdot, \cdot\}_P$: Poissonklammer

$$(40) \quad \{q_j, q_e\}_P = 0 \quad \{p_j, p_e\}_P = 0$$
$$\{q_j, p_e\}_P = \delta_{je}$$

Korrespondenzprinzip

Kartesische Koordinaten q und Impulse p werden durch Operatoren $\hat{q}$ und $\hat{p}$ ersetzt. Anstelle der Poissonalgebra von oben tritt die Heisenbergalgebra

$$(41) \quad \boxed{\begin{aligned} [\hat{q}_j, \hat{q}_e] &= [\hat{p}_j, \hat{p}_e] = 0 \\ [\hat{q}_j, \hat{p}_e] &= i\hbar \delta_{je} \end{aligned}}$$

Bem: (1) Wir werden im Nachhinein sehen, daß dies

vernünftig ist

(ii) Es ist wichtig, daß wir das Korrespondenzprinzip für kartesische Koordinaten definiert haben

Mit Hilfe von $\hat{q}_j, \hat{p}_j$ können alle aus der klassischen Mechanik bekannten Observablen in die Quantenmechanik übersetzt werden

$$(42) \quad F(q_j, p_j) \xrightarrow{\text{klass. Mechanik}} F(\hat{q}_j, \hat{p}_j) \Big|_{\text{symmetr. Q.-Mechanik}}$$

wobei beachtet werden muß, daß eine symmetrische Form der Funktion F verwendet werden muß, da auf Operatorebene die Reihenfolge der Größen nicht mehr egal ist.

$$\text{D.h. z.B. (i)} \quad x p \longrightarrow \frac{1}{2} (\hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x})$$

$$(ii) \quad \underline{\text{Drehimpuls}} \quad \vec{L} = \vec{q} \times \vec{p} = \varepsilon_{ijk} q_j p_k \vec{e}_i$$

hier ist Symmetrisierung nicht notwendig da $[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = 0$ für $j \neq k$, d.h.

$$(43) \quad \vec{L} = \vec{q} \times \vec{p}$$

(iii) Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$(44) \quad \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

Für praktische Rechnungen ist es vorteilhaft Zustandsvektoren und Operatoren in verschiedenen Basen darzustellen.

Ortdarstellung von Zustand und Operatoren

Der Ortoperator ist ein selbstadjungierter* Operator mit (kontinuierlichen) Eigenwerten x und zugehörigen Eigenzuständen $|x\rangle$.

(* streng genommen müssen wir hier ein paar Einschränkungen machen, das ignorieren wir aber erst einmal.)

$$(45) \quad \hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

Nehmen wir zunächst an, daß der Ort nur diskrete Werte x_n annehmen kann. Dann gilt für jeden Zustand

$$(46) \quad |\varphi\rangle = \sum_n \langle x_n | \varphi \rangle |x_n\rangle$$

Es gilt

$$(47) \quad \sum_n |x_n| \langle x_n | = \mathbb{1}$$

Die komplexen Zahlen

$$(47) \quad \varphi_n = \langle x_n | \varphi \rangle \quad |\varphi\rangle \longleftrightarrow \varphi_n$$

charakterisieren den Zustand vollständig. Sie werden Ortdarstellung von $|\varphi\rangle$ genannt. Geht man zum Kontinuum über mit $x \in \mathbb{R}$ und EV $|x\rangle$ gilt

$$(48) \quad |\varphi\rangle = \int dx \varphi(x) |x\rangle$$

Die komplexwertige Funktion

$$(49) \quad \varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle \quad |\varphi\rangle \longleftrightarrow \varphi(x)$$

heißt Ortdarstellung, oder Ortraumwellenfunktion des Zustandes.

Während für die diskreten Eigenzustände gilt

$$(50) \quad \langle x_n | x_m \rangle = \delta_{nm}$$

muß man für den kontinuierlichen Fall eine Verallgemeinerung einführen, d.h. für zwei

Eigenzustände $|x\rangle, |y\rangle$ des Operators $\hat{x}$ gilt dann
 (51) $\langle x | y \rangle = \delta(x-y)$

und somit auch

$$|y\rangle = \int dx \langle x | y \rangle |x\rangle = \int dx \delta(x-y) |x\rangle = |y\rangle \quad \checkmark$$

Analog zu den Zuständen können auch Operatoren durch Eigenzustände des Orhopoperators ausgedrückt werden: Im diskreten Fall hat man

$$\hat{A} \longleftrightarrow A_{nm} = \langle x_n | \hat{A} | x_m \rangle$$

wobei

$$\begin{aligned} \hat{A} |\varphi\rangle &= \underbrace{\sum_n |x_n\rangle \langle x_n|}_{= \mathbb{I}} \hat{A} |\varphi\rangle \\ &= \sum_n \langle x_n | \hat{A} | \varphi \rangle \cdot |x_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle x_n | \hat{A} | x_m \rangle \langle x_m | \varphi \rangle |x_n\rangle \end{aligned}$$

bzw

$$(52) \quad \hat{A} = \sum_{n,m} |x_n\rangle \underbrace{\langle x_n | \hat{A} | x_m \rangle}_{\sum_m \rightarrow \mathbb{I}} \underbrace{\langle x_m |}_{\sum_n \rightarrow \mathbb{I}}$$

- 32 -

Im kontinuierlichen Fall

$$(53) \quad \hat{A} = \int dx \int dy \quad |x\rangle \underbrace{\langle x | \hat{A} | y \rangle}_{= A(x,y)} \langle y|$$

bzw.

$$(54) \quad \begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle &= \int dx \int dy \langle \phi | x \rangle A(x,y) \langle y | \psi \rangle \\ &= \int dx \int dy \phi^*(x) A(x,y) \psi(y) \end{aligned}$$

d.h.

$$\hat{A} \longleftrightarrow A(x,y) = \langle x | \hat{A} | y \rangle$$

Offensichtlich gilt

$$(55) \quad \langle y | \hat{x} | x \rangle = x \delta(x-y)$$

Frage: Was ist

$$\langle y | \hat{p} | x \rangle = ?$$

Es gilt $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, d.h.

$$(\hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x}) |x\rangle = i\hbar |x\rangle$$

Und $\langle y | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | x \rangle = i\hbar \langle y | x \rangle = i\hbar \delta(y-x)$

$$y \langle y | \hat{p} | x \rangle - \langle y | \hat{p} | x \rangle x = i\hbar \delta(y-x)$$

$\Rightarrow$
(56)

$$\langle y | \hat{p} | x \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x)$$

$\xrightarrow{\quad \uparrow \quad \uparrow}$
wirkt auf alles rechts

dann

$$\frac{\hbar}{i} y \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x) x$$

$$= x \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x) + \delta(y-x)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \underbrace{(y-x) \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x)}_{=0} - \frac{\hbar}{i} \delta(y-x) = i\hbar \delta(y-x) \quad \checkmark$$

Damit ergibt sich folgende Äquivalenz (Ordnungsdarstellung)

(57)

$\mathcal{H}$	$\longleftrightarrow$	$\mathcal{H} = \mathcal{L}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$
$ \psi\rangle$	$\longleftrightarrow$	$\psi(x)$
$\langle \phi \psi \rangle$	$\longleftrightarrow$	$\int dx \phi^*(x) \psi(x)$
$\hat{x} \psi \rangle$	$\longleftrightarrow$	$x \psi(x)$
$\hat{p} \psi \rangle$	$\longleftrightarrow$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$

Bspl. $\hat{\vec{L}} |\psi\rangle = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \vec{e}_i |\psi\rangle$
 $\longleftrightarrow \vec{e}_i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{x})$

Impulsdarstellung von Zuständen und Operatoren

Analog kann man mit Eigenzuständen des Impulses verfahren $p = \hbar k$

$\mathcal{H}$	$\longleftrightarrow$	$\mathcal{H} = \mathcal{L}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$
$ \psi\rangle$	$\longleftrightarrow$	$\tilde{\psi}(k)$
(58) $\langle \phi \psi \rangle$	$\longleftrightarrow$	$\int dk \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\psi}(k)$
$\hat{p} \psi\rangle$	$\longleftrightarrow$	$\hbar k \tilde{\psi}(k)$
$\hat{x} \psi\rangle$	$\longleftrightarrow$	$i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\psi}(k)$

Orbraumwellenfunktion des Impulseigenzustandes

$$\langle x | k \rangle = \psi_k(x) = ?$$

$$\langle x | \hat{p} | k \rangle = \hbar k \langle x | k \rangle = \hbar k \psi_k(x)$$

andere sein

$$\langle x | \hat{p} | k \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_k(x)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \varphi_k(x) = i k \varphi_k(x)$$

$$(59) \quad \langle x | k \rangle = \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad \begin{array}{l} 1/\sqrt{2\pi} \\ \text{Konvention} \end{array}$$

Damit sind Orts- und Impulsraum wellenfunktionäre
Fouriertransformierte

$$(60) \quad \begin{aligned} \varphi(x) &= \langle x | \varphi \rangle = \int dk \langle x | k \rangle \langle k | \varphi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{\varphi}(k) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(k) &= \langle k | \varphi \rangle = \int dx \langle k | x \rangle \langle x | \varphi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} \varphi(x) \end{aligned}$$

Spektrum eines selbstadjungierten Operators

$$\text{Eigenwertgleichung} \quad \hat{A} | \lambda \rangle = \lambda | \lambda \rangle \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

reines Punktspektrum

λ_n

rein kontinuierliches
Spektrum

λ

kontinuierliches Spektrum
mit eingebetteten diskreten
Eigenwerten

Def: Wenn zum selben Eigenwert n
Eigenzustände existieren, spricht man
von n -facher Entartung des Eigenwerts

1.4 Messungen in der Quanten- mechanik

Postulat 3a

Die Messung einer Observablen mit
diskretem, nicht entarteten Spektrum
im Zustand $|\psi\rangle$ liefert den Eigen-
wert a_n von $\hat{A}$ mit a-priori
Wahrscheinlichkeit

$$P(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

woher $|a_n\rangle$ der zu a_n gehörige
EV ist

Nach der Messung geht der Zustand
in den EV über

$$|\psi\rangle \longrightarrow "a_n" \longrightarrow |\psi'\rangle = |a_n\rangle$$

Bem: liegt eine l -fache Entartung vor, so ist die Wahrscheinlichkeit gegeben durch

$$(67) \quad p(a_n) = \sum_{j=1}^l |\langle a_{nj} | \psi \rangle|^2$$

Was der Zustand ist werden wir später diskutieren!

Beispiel: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ dh $\mathbb{C} = \mathbb{C}^2$

Observable

$$\hat{O}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$EV: \quad \lambda = 1 \quad |\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = -1 \quad |\phi_{-1}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow p(\lambda=1) = |\langle \phi_1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$p(\lambda=-1) = |\langle \phi_{-1} | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung

Erwartungswert

$$(62) \quad \boxed{E(A) \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle}$$

denn:

↑ kurze Notation

$\hat{P}_n \equiv |a_n\rangle\langle a_n|$ Projektor auf EV $|a_n\rangle$

es gilt $\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \mathbb{1}$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | a_n \rangle \underbrace{\langle a_n | \hat{A} | a_m \rangle}_{= \underbrace{\langle a_n | a_m \rangle}_{\delta_{nm}}} \langle a_m | \psi \rangle$$

$$= \sum_n |\langle \psi | a_n \rangle|^2 a_n = \sum_n p(a_n) a_n \quad \checkmark$$

Höhere Momente: analog

$$\langle \psi | \hat{A}^m | \psi \rangle = \sum_n p(a_n) a_n^m$$

speziell Schwankungsquadrat:

$$(6.3) \quad \Delta A^2 = \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \\ = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

gibt mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$ an.

$$(6.4) \quad \Delta A = \sqrt{\Delta A^2} = \sqrt{\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle} \quad \text{Varianz}$$

Bspl: $\hat{Q}^2 \quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\langle \hat{Q}_z \rangle = p(1) \cdot 1 + p(-1) \cdot (-1) = 0$$

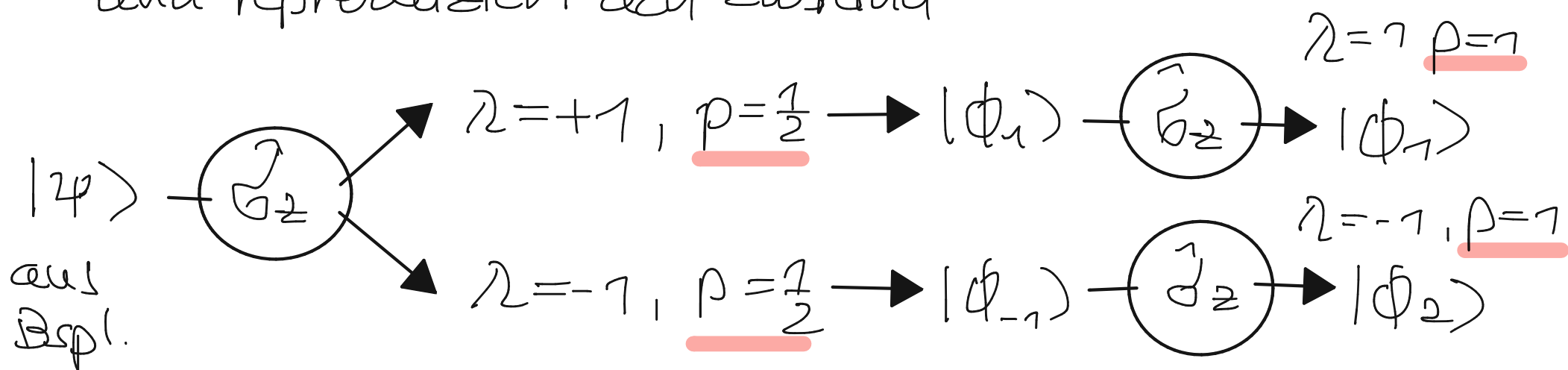
oder

$$\langle \hat{Q}_z^2 \rangle = \langle \hat{Q}_z^2 \rangle - \langle \hat{Q}_z \rangle^2 = \langle \hat{Q}_z^2 \rangle$$

$$= p(1) \cdot 1^2 + p(-1) \cdot (-1)^2 = 1$$

Was passiert wenn wir eine Messung wiederholen?

Wiederholte Messung liefert denselben Meßwert und reproduziert den Zustand



Messung ändert den Zustand

(außer $|\psi\rangle$ war Eigenzustand der Observable)

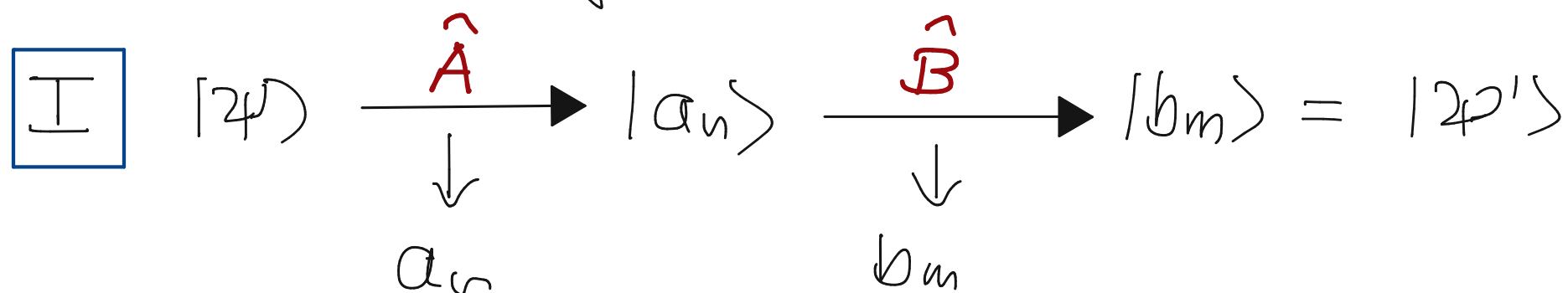
Nun betrachten wir die Messung zweier Observable

$\hat{A}, \hat{B}$
es sei

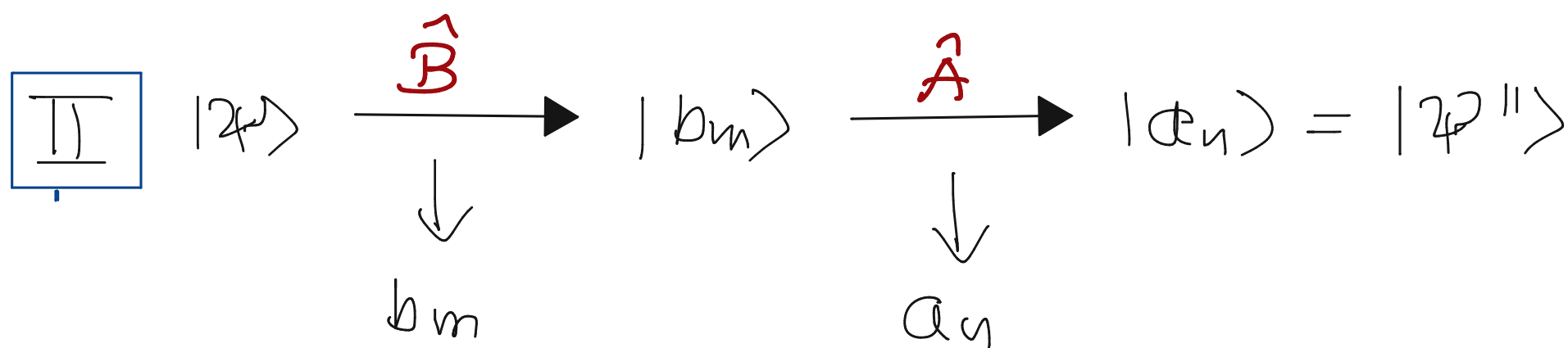
$$\hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$$

$$\hat{B} |b_n\rangle = b_n |b_n\rangle$$

$\hat{A}$ und $\hat{B}$ werden nun in unterschiedlicher Reihenfolge
nacheinander gemessen



$$p_1 = |\langle \psi | a_n \rangle|^2 \quad p_2 = |\langle a_n | b_m \rangle|^2$$



$$p_3 = |\langle \psi | b_m \rangle|^2 \quad p_4 = |\langle b_m | a_n \rangle|^2$$

in I $p_I(b_m, a_n) = p_2 \cdot p_1$

in II $p_{II}(a_n, b_m) = p_4 \cdot p_3$
 $= p_2 \cdot p_3$

Verbandwahr-
scheinlichkeit
 a_n und b_m
zu messen

$\Rightarrow$
(65)

$$p_I(b_m, a_n) \neq p_{II}(a_n, b_m)$$

i.A.

$$|\psi'\rangle \neq |\psi''\rangle$$

Meßwahrscheinlichkeiten und Zustände nach der
Messung hängen i.A. von der Reihenfolge der
Messungen ab!

Bsp1: $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$

EV $\hat{\sigma}_x$ $\hat{\sigma}_y$

$$\lambda = 1 \quad |\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = 1 \quad |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$\lambda = -1 \quad |\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = -1 \quad |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

• $P(\sigma_y = 1, \sigma_x = 1) = ?$

$$= |\underbrace{\langle \psi_+ | \phi_+ \rangle}_{2. \text{ Messung } 1/2}|^2 \cdot |\underbrace{\langle \phi_+ | \psi \rangle}_{1. \text{ Messung } \frac{1}{4}(2+\sqrt{3})}|^2 = \frac{1}{8} (2+\sqrt{3}) \approx \underline{0.466}$$

• $P(\sigma_x = 1, \sigma_y = 1) = ?$

$$= |\underbrace{\langle \phi_+ | \psi_+ \rangle}_{2. \text{ Messung}}|^2 \cdot |\underbrace{\langle \psi_+ | \psi \rangle}_{1. \text{ Messung}}|^2 = \frac{1}{4} = \underline{0.25}$$

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

$\Rightarrow \exists$ gemeinsamer Satz von Eigenvektoren

Bem: "Es existiert" heißt nicht daß jeder Satz von Eigenvektoren von $\hat{A}$ auch ein Satz von Eigenvektoren von $\hat{B}$ ist!

Beweis: ohne

Falls $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ein nichtentarteter Punktspektrum haben

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

$\Downarrow$

$$(66) \quad \begin{aligned} \hat{A} |\lambda_n\rangle &= \underline{a_n} |\lambda_n\rangle \\ \hat{B} |\lambda_n\rangle &= \underline{b_n} |\lambda_n\rangle \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{Selbe EV aber} \\ \text{i. A. unterschiedliche EW} \end{array}$$

$$p(b_m, a_n) = \underbrace{|\langle \lambda_m | \lambda_n \rangle|^2}_{\delta_{mn}} |\langle \lambda_n | \varphi \rangle|^2 = \delta_{mn} p_n$$

$$p(a_n, b_m) = \underbrace{|\langle \lambda_n | \lambda_m \rangle|^2}_{\delta_{mn}} |\langle \lambda_m | \varphi \rangle|^2 = \delta_{mn} p_n$$

$$(67) \quad p(b_m, a_n) = p(a_n, b_m)$$

Ein Satz paarweise kommutierender Observabler $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ kann gleichzeitig gemessen werden, d. h. das Meßergebnis hängt nicht von der Reihenfolge der Messungen ab.

Man spricht auch von verträglichen Observablen

- Einem q.m. Zustand kann eindeutig ein Wert einer Observable (Ort, Impuls, ...) zugeordnet werden, wenn dieser ein Eigenzustand (EV) der Observable ist.
- Einem q.m. Zustand können eindeutig die Werte mehrerer Observable zugeordnet werden, wenn alle diese Observablen paarweise kommutieren (verträglich sind)
- Einem q.m. Zustand können keine eindeutige Werte nicht kommutierender Observabler zugeordnet werden!

Unterschied zur klassischen Physik

Allgemeine Unschärferelation

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$ seien Observable

$$\tilde{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad \tilde{B} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$$

$\langle \dots \rangle$ bezieht sich auf einen Zustand $|\psi\rangle$

Es gilt offensichtlich

$$(b\&) \quad [\tilde{A}, \tilde{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] \quad \langle \tilde{A}^2 \rangle = \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle$$

Für jeden Zustand $|\psi\rangle$ gilt:

$$\begin{aligned}
 0 &\leq \|(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})|\psi\rangle\|^2 \\
 &= \langle (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})\psi | (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})\psi \rangle \\
 &= \langle \psi | (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})^\dagger (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) |\psi \rangle \\
 (69) \quad &= \langle \psi | (\tilde{A} + i\lambda\tilde{B})(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) |\psi \rangle \\
 &= \underbrace{\langle \tilde{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle - i\lambda \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle}_{\equiv f(\lambda)}
 \end{aligned}$$

Was ist der minimale Wert von $f(\lambda)$?

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{d}{d\lambda} f(\lambda) = 2\lambda \langle \tilde{B}^2 \rangle - i \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle \\
 \lambda_{\min} &= \frac{i}{2} \frac{\langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle}{\langle \tilde{B}^2 \rangle}
 \end{aligned}$$

Einsetzen in (69) liefert

$$0 \leq \langle \tilde{A}^2 \rangle + \frac{1}{4} \frac{(i \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle)^2}{\langle \tilde{B}^2 \rangle} - \frac{1}{2} \frac{(i \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle)^2}{\langle \tilde{B}^2 \rangle}$$

d.h.

$$0 \leq \langle \tilde{A}^2 \rangle \langle \tilde{B}^2 \rangle - \frac{1}{4} (i \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle)^2$$

Mit den Beziehungen (68) folgt:

$$(70) \quad \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} (i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle)^2$$

allgemeine Unschärfrelation

Gl. (70) besagt, daß falls $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, d.h. wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ nicht gleichzeitig meßbar sind, dann gibt es i.A. keinen Zustand $|\varphi\rangle$ für den gilt

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle = 0$$

Ausnahme: wenn $\langle \varphi | [\hat{A}, \hat{B}] | \varphi \rangle = 0$

Zustände bei denen in Gl. (70) das Gleichheitszeichen gilt heißen Zustände minimaler Unschärfe

Bspl: $\hat{x}, \hat{p} \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$(71) \quad \langle \Delta \hat{x}^2 \rangle \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Heisenbergsche Unschärfrelation

► Nun betrachten wir Observable mit kontinuierlichem Spektrum, z.B. $\hat{x}, \hat{p}$

Hier ist die Wahrscheinlichkeit einen präzisen (reellen) Wert zu messen sehr null da das Ereignis vom Maße null ist. Stattdessen betrachten wir Intervalle

$$a_1 \leq a \leq a_2 \iff \hat{P}(a_1, a_2) \text{ Projektor}$$

Postulat 3b

Die Messung einer Observablen $\hat{A}$ mit kontinuierlichem Spektrum im Zustand $|\psi\rangle$ liefert ein Intervall $I: a_1 < a \leq a_2$ von Eigenwerten mit Wahrscheinlichkeit

$$(72) \quad P(I) = \langle \psi | \hat{P}(a_1, a_2) | \psi \rangle$$

Nach der Messung geht das System in den Zustand

$$(73) \quad |\psi'\rangle = N \hat{P}(a_1, a_2) |\psi\rangle$$

über. (N - Normierungskonstante)

Bsp.: $|\psi\rangle \quad \hat{X}$ im Intervall $x_1 < x \leq x_2 \equiv I$

$$P(I) = \langle \psi | \hat{P}(x_1, x_2) | \psi \rangle$$

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

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

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

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

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

in der Tat findet man $f(\sigma_x) = \sigma_x^2$

man ist in Ortsdarstellung

$$\hat{P}(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} dx |x\rangle \langle x|$$

$$\Rightarrow P(I) = \int_{x_1}^{x_2} dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

$$= \int_{x_1}^{x_2} dx \psi^*(x) \psi(x) = \int_{x_1}^{x_2} dx |\psi(x)|^2$$

1.5 Dynamik in der Quantenmechanik

Die Zeitentwicklung eines q.m. Zustandes soll durch eine lineare Operation

$$(74) \quad |\psi(t_0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

beschrieben werden. Dabei soll die Normierung erhalten bleiben

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \underbrace{\hat{U}(t, t_0)}_{\psi_0} \underbrace{\psi(t_0)}_{\psi_0} | \underbrace{\hat{U}(t, t_0)}_{\psi_0} \underbrace{\psi(t_0)}_{\psi_0} \rangle$$

$$= \left\langle \underbrace{\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1}}_{\psi(t)} \underbrace{\hat{U} \psi_0}_{\psi(t)} \middle| \underbrace{\hat{U} \psi_0}_{\psi(t)} \right\rangle + \left\langle \underbrace{\hat{U} \psi_0}_{\psi(t)} \middle| \underbrace{\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1}}_{\psi(t)} \underbrace{\hat{U} \psi_0}_{\psi(t)} \right\rangle$$

$$= \langle \psi(t) | (\dot{U} U^{-1})^\dagger \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \dot{U} U^{-1} \psi(t) \rangle$$

$$\Rightarrow (75) \quad (\dot{U} U^{-1})^\dagger = -\dot{U} U^{-1} \quad \text{anti-hermitisch}$$

$$(76) \quad \text{d.h.} \quad \dot{U} U^{-1} = \pm i \hat{K} \quad \hat{K} = \hat{K}^\dagger$$

Differentialgleichung

$$(77) \quad \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \pm i \hat{K} \hat{U}(t, t_0)$$

mit Anfangsbedingung

$$(78) \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

liefert

$$(79) \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{\pm i \hat{K} (t - t_0)}$$

Was ist $\hat{K}$? $\hat{K}$ muß physikalische Dimension einer inversen Zeit (Frequenz) haben.

Die einzige dimensionsbehaftete Konstante in der Quantenmechanik ist $\hbar$ $\Rightarrow$

$$\hat{K} = \text{Energie} / \hbar$$

Die "Energie" identifizieren wir jetzt mit

dem Hamiltonoperator, d.h.

$$(80) \quad U(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0) \right\}$$

unitärer Zeitentwicklungsoperator

Bem: jeder unitäre Operator kann in der Form $\hat{U} = e^{i\hat{K}}$ mit $\hat{K}^\dagger = \hat{K}$

geschrieben werden.

$$\hat{U}^\dagger = (e^{i\hat{K}})^\dagger = e^{-i\hat{K}^\dagger} = e^{-i\hat{K}} = \hat{U}^{-1}$$

Aus Gl. (80) folgt eine Differentialgleichung für die Zeitentwicklung eines Zustandes

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \dot{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U} |\psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

$$(81) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

zeitabhängige Schrödingergleichung

in abstrakter Form (Dirac-Notation)

Bsp1: ein Teilchen in einem Potential $V(\vec{r})$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$(82) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) |\psi(t)\rangle$$

Ortdarstellung $|\psi(t)\rangle \longrightarrow \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{r}, t)$
 $\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad \vec{r} \longrightarrow r$

Multiplikation von Gl. (82) mit $\langle \vec{r} | \Rightarrow$

$$(83) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

Schrödingergleichung in Ortdarstellung

stationäre Zustände, stationäre Schrödingergleichung

Wir wollen einen Zustand stationär nennen, wenn Erwartungswerte von Observablen nicht mehr zeitabhängig sind, d.h. wenn für alle $\hat{A}$

$$(84) \quad \langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle_{t_0}$$

Das ist gerade der Fall für Eigenzustände von $\hat{H}$

(#5)

$$\hat{H} |\phi_E\rangle = E |\phi_E\rangle$$

stationäre Schrödingergleichung (SGL) ^{stationär}

Sei $|\psi(t_0)\rangle = |\phi_E\rangle$ zur Zeit $t = t_0$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

(#6)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E (t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

Offensichtlich gilt für jede Observable $\hat{A}$

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle =$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} E (t-t_0)} \langle \psi(t_0) | \hat{A} | \psi(t_0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E (t-t_0)} = \text{konst.}$$

► Die Lösung der stationären SGL, d.h. die Kenntnis aller Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{H}$ erlaubt eine allgemeine Lösung der zeitabhängigen SGL

Annahme: Wir kennen E_n und $|E_n\rangle$

(#7)

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

$\{|E_n\rangle\}$ bilden einen vollständigen Satz von Basisvektoren (ONB) bzw. im Falle von Entartungen kann man einen solchen Satz konstruieren.

$$|\psi_n(t)\rangle \equiv |E_n\rangle e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

Wegen der Vollständigkeit der $|E_n\rangle$ gilt für jeden Zustand $|\psi(t)\rangle$

$$(88) \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n(t) |E_n\rangle e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

Einschreiben in zeitabh. SGL (87) liefert

$$(89) \quad \dot{\alpha}_n(t) = 0, \text{ d.h. } \alpha_n(t) = \alpha_n = \text{const.}$$

D.h.

$$(90) \Rightarrow \begin{aligned} |\psi(t=0)\rangle &= |\psi_0\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \sum_n \alpha_n |E_n\rangle e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \\ \text{mit } \alpha_n &= \langle E_n | \psi_0 \rangle \end{aligned}$$

allg. Lösung der zeitabh. Schrödingergleichung

Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik

In der klassischen Mechanik hatten wir gesehen, daß es für bestimmte Systeme Erhaltungsgrößen gibt

(Energie, Drehimpuls, ...) Was ist das Pendant dazu in der Quantenmechanik? D.h. wann gilt

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \text{konst} \quad \text{oder} \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = 0 \quad ?$$

Es gilt im Allgemeinen

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \dot{\psi}(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \dot{\psi}(t) \rangle$$

mit (87) $\Rightarrow$

$$= \langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{A}] | \psi(t) \rangle$$

Dieser Ausdruck ist für alle Zustände $|\psi(t)\rangle$ gleich null für $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$

Observable $\hat{A}$, die mit dem Hamiltonoperator vertauschen sind Erhaltungsgrößen, d.h. konstanten der Bewegung

$$(91) \quad [\hat{H}, \hat{A}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = 0$$

für alle Zustände.

Bem.: • falls $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ und somit
 $\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = 0$ dann gilt auch

$$\frac{d}{dt} \langle f(\hat{A}) \rangle_t = 0$$

• falls $[\hat{H}, \hat{A}] = [\hat{H}, \hat{B}] = 0$
und $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ gilt außerdem

$$\frac{d}{dt} \langle f(\hat{A}, \hat{B}) \rangle_t = 0$$

Bspl.: freies Teilchen $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$

• offensichtlich $[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$ d.h. Impuls
 ist Erhaltungsgröße

• Es gilt ebenfalls $[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = 0$
 d.h. auch der Drehimpuls ist
 Erhaltungsgröße