Theoretische Physik 4 - Quantenmechanik (Hebecker)

Robin Heinemann

6. Mai 2018

Inhaltsverzeichnis

1 Materiewellen und Schrödinger-Gleichung

1.1 Motivation

Quantenmechanik ist experimentell motiviert. Trotzdem gibt es rein theoretisch argumentierbare Probleme mit dem klassischen Weltbild.

1. Gleichverteilung der Energie, zum Beispie im Hohlraum; unendlich viele Moden mit kurzer Wellenlänge $1/2kT$ pro Freiheitsgrad $\to$ „Ultraviolett Katastrophe“
2. Selbstwechselwirkung des Elektrons „Radiation reaction“ (eigenes Feld „beschleunigt“ immer weiter)

Experimentelle Befunde:

1. Quantisierung (der Energie) des Lichtes: $E = \hbar\omega$ (photoelektrischer Effekt)
2. Sabilität und Energiequatisierung von H
3. Stern-Gerlach (Spin-Quantisierung)
4. Doppelspalt

1.2 Materiewellen

Befund: Teilchenstrahlen interferieren wie Wellen $\rightarrow$

1. Teilchen werden durch Wellen beschrieben
$$\psi(\vec{x},t) \sim e^{i\left(\vec{k}\vec{x}-\omega t\right)}$$
2. Superpositions-Prinzip
$$\psi_{\text{ges}} = \psi_1 + \psi_2$$
3. Intensitätkurve $\sim$ Aufentalswahrscheinlichkeit $\sim |\psi(\vec{x},t)|^2$ (Ausschluss: $|\psi|^\alpha$, sin-Welle)

Hinzu kommt: $E = \hbar\omega$.

Teilchen: 3 Parameter ($\vec{p}$), Welle: 4 Parameter: $\vec{k},\omega$. Erwartung: $\omega = \omega\left(\vec{k}\right)$, $\vec{k} \leftrightarrow \vec{p}$ eindeutig. Beschreibe (lokalierte) Teilchen durch Wellenpakete:

$$\psi(\vec{x},t) = \int \mathrm{d}^3k f_{\vec{k}_0}\left(\vec{k}\right)e^{i\left(\vec{k}\vec{x}-\omega\left(\vec{k}\right)t\right)}$$

Maxima bei $\vec{k}_0$ zum Beispiel 3d-Gauß-Kurve
$\rightarrow \psi$ bei $t=0$ ist Fouriertransformation zu f, zum Beispiel auch Gauß-Kurve
$\rightarrow$ lokalisiertes Teilchen mit Impuls $\sim \vec{p}\left(\vec{k}_0\right)$
Geschwindigkeit des Wellenpakets (beziehungsweise Teilchen):

$$\textbf{Gruppengeschwindigkeit:} \quad \vec{v} = \vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega; \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\vec{p}^2}{2m\hbar}$$

Außerdem: $\vec{p} = \vec{p}\left(\vec{k}\right)$; Wir rechnen:

$$\frac{p_i}{m} = v_i = \frac{\partial\omega}{\partial k_i} = \frac{\partial\omega}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial k_i} = \frac{p_j}{m\hbar}\frac{\partial p_j}{\partial k_i}$$

$\Longrightarrow$ damit die Gleichheit gilt muss gelten

$$\frac{\partial p_j}{\partial k_i} = \hbar\delta_{ij} \implies \vec{p} = \hbar\vec{k} + \text{const.}$$

Dabei wählen wir sinnvoller Weise const. als 0, damit $k=0 \implies p=0$. Wir erhalten die Dispersionsrelation:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}\vec{k}^2$$

Zurück zur einzelnen ebenen Welle:

$$\psi(\vec{x},t) \sim e^{i\left(\vec{k}\vec{-}\omega t\right)}$$

Diese löst die Differentialgleichungen:

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t) = \vec{p}\psi(\vec{x},t)$$
$$\text{beziehungsweise} \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial x^i}\psi(\vec{x},t) = p_i\psi(x,t) \quad i=1,2,3$$

Ab jetzt zur Einfachheit $d=1$:

$$\psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}$$
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = p\psi(x,t)$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung, analog zu

$$M_{ij}y_j = \lambda y_i \quad i,j \in \{1,\dots,n\}$$

$\vec{y}$ ist der Eigenvektor zur Matrix („Operator“) M zum Eigenwert λ. Unserer Fall:

- Operator ist Differentialoperator
- Vektorraum ist Raum der Funktionen ψ

Merke: Operator $i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ eng verbunden mit Impuls p. (in $d = 3$: $-i\hbar\vec{\nabla} \leftrightarrow \vec{p}$)

1.3 Schrödingergleichnug

obige Differentialgleichung zu einfach, brauchen Zeitentwicklung (Ableitung nach t in Differentialgleichnug). Unsere Welle genügt einer solchen, „interessanteren" Differentialgleichung, der **Wellengleichung**:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

Dies ist schlicht die in Differentialgleichungsform gegossene Dispersionsrelation:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{beziehungsweise} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Verallgemeinerung: Potential $V \neq 0$ zulassen. Erwartung: im Bereich $V > 0$ ist kinetische Energie kleiner: $E - V$. $\implies$ p kleiner $\implies$ k kleiner. Einbau in unsere Differentialgleichnug:

$$\frac{p^2}{2m} \to \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

entspricht

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{x^2} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Auch zurück zu 3d:

Schrödingergleichung

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

Diese Gleichung + Interpretation von $|\psi(\vec{x},t)|^2$ als Aufenhaltwahrscheinlichkeit definiert bereits die Quantenmechanik. Es fehlt:

- mathematischer Formalismus (Hilbertraum, Operatoren, ...)
- Anwendungen (Oszillator, Wasserstoffatom, Tunneleffekt, ...)
- Verallgemeinerungen (Teilchen mit Spin, viele Teilchen)

Besser: Fermat-Prinzip für Wellen, Zusammenhang mit Wirkungsprinzip.
Andere Schreibweise für Schrödingergleichung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \hat{H}\psi(\vec{x},t)$$

$$\text{mit } \hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}V(\vec{x}), \vec{p} \equiv i\hbar\vec{\nabla}$$

$\vec{p}$: Zusammenfassung von 3 Differentialoperatoren $\to$ Differentialoperator für $\hat{T}$ $\to$ Differentialoperator für Energie $\hat{H} = \hat{T} - \hat{V}$. Dabei ist $\hat{V}$ ein „Differentialoperator" nullter Ordnung und $\hat{H}$ bezeichnen wir mit $\hat{H}$ (bestimmt Zeitentwicklung der Wellenfunktion)

1.4 Die neue Weltsicht der Quantenmechanik

Hamilton-Mechanik

- Physikalischer Zustand: Punkt im Phasenraum (zu Koordinaten)
- zeitliche Entwicklung: System von nichtlineare, gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung (Definiton durch Hamilton-Funktion)

Quantenmechanik

- Physikalischer Zustand: Schrödinger-Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ bei festem t (nur auf Konfigurationsraum). Konfigurationsraum $\equiv$ Raum der x^i (ohne p^i).
- zeitliche Entwicklung: lineare (allerdincgs partielle) Differentialgleichung (Definition durch den aus der Hamilton-Funktion folgenden ($p_i \to i\hbar\partial_i$)Hamilton-Operator $\hat{H}$.)

Linearität der Schrödingergleichung $\implies$ Summen von Lösungen und Produkte mit Zahlen aus $\mathbb{C}$ sind wieder Lösungen. $\to$ se ist nützlich, die lineare Struktur des Raumes der ψ zu betonen. Fokus auf Zustände (ohne t): $d = 1$

$$\psi(\cdot, t) : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, x \mapsto \psi(x, t)$$
$$\text{oder } \psi_t : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, x \mapsto \psi_t(x) \equiv \psi(x, t)$$

Betrachte den Vektorraum $\mathcal{H}$ der Funktionen ψ_t:

$$\psi_t \in \mathcal{H}$$

im Moment: $\mathcal{H}$ (Hilbert-Raum) $\to$ Raum der erlaubten Funktionen.
Ab sofort: Denken sie an die ψ_t als Vektoren in einem unendlichdimensionalen Raum. (Denken sie sich zum Beispiel x als diskrete Variable) Zeintentwicklung ist die Bewegung des Vektors ψ_t auf Grund der Schrödingergleichung $\psi_t \to \psi_{t+\Delta t}$
Neuer Schritt: Definiere auf $\mathcal{H}$ ein (komplexes) Skalarprodukt

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}, (\psi, \chi) \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x)\chi(x) \equiv \langle\psi|\chi\rangle$$

(Bra-ket Notation). Skalarprodukt respektiert lineare Struktur von $\mathcal{H}$ (Sesquilinearform):

$$\langle\psi|\alpha_1\chi_1 + \alpha_2\chi_2\rangle = \alpha_1 \langle\psi|\chi_1\rangle + \alpha_2 \langle\psi|\chi_2\rangle \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$$
$$\langle\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2|\chi\rangle = \alpha_1^* \langle\psi_1|\chi\rangle + \alpha_2^* \langle\psi_2|\chi\rangle \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$$

Sesquilinearität notwendig für reelle Norm:

$$\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$\implies$ erster und wichtigster Schritt zur Definition von $\mathcal{H}$:

- ψ soll quadratintegrabel sein ($\psi \in L_2(\mathbb{R})$, hier wirklich Lebesgue-Integral, die 2 im Index wegen $\int \mathrm{d}x|\psi|^2$)

Bedeutung des Skalarproduktes: kommt aus Annahme dass $|\psi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchen ist. Zunächst: physikalische Zustände sollen stets auf 1 normiert sein: $\|\psi\| = 1 \iff \langle\psi|\psi\rangle = 1$. (Falls sie ψ_1 mit $\langle\psi|\psi\rangle \neq 1$ betrachten sollen, dann ein $\psi(x) = \psi_1(x)\|\psi_1\|^{-1}$). Definiere Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(x) \equiv \psi^*(x)\psi(x)$$

$\Longrightarrow$ Normierungsbedingung $\|\psi\| = 1 \triangleq$ 2. Kolmogorov-Axiom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x)\psi(x) \equiv \|\psi\|^2 = 1$$

Präzisierung des anfas gesagten:

$$W([a,b]) = \int_a^b \mathrm{d}x \rho(x) = \int_a^b \mathrm{d}x |\psi(x)|^2$$

$\rightarrow$ Wahrscheinlichkeit für Auffinden im Interval $[a,b]$ (stets $\leq\ 1$). Wir stellen jetzt Verbindung zum Begriff des Skalarproduktes her. Betrachte Wahrscheinlichkeit für Teilchen in kleinem Intervall $[a, a + \Delta a]$. Dies ist Spezialfall zur obigen Formel. Anders Schreiben: Definition neuer Wellenfunktion χ:

$$\chi(x) = \begin{cases} \chi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Delta a}} & x \in [a, a + \Delta a] \\ 0 & \text{nonst} \end{cases}$$

Dieser Zustand beschreibt ein bei a lokalisiertes Teilchen. Berechne

$$\langle \chi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \chi^*(x)\psi(x) = \int_a^{a+\Delta a} \mathrm{d}x \frac{\psi(x)}{\sqrt{\Delta a}} \approx \sqrt{\Delta a}\psi(x)$$
$$|\langle \chi|\psi \rangle|^2 \approx \Delta a |\psi(x)|^2$$

Das ist gerade die mit $\rho(x)$ berechntete Wahrscheinlichkeit Teilchen im Intervall $[a, a, +\Delta a]$ zu finden. $\rightarrow$ Motivation für

Bournsche Regel

Sei ein physikalisches System in Zustand $\psi \in \mathcal{H}$. Seit $\chi \in \mathcal{H}$ ein anderer Zustand. Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand χ anzustreffen gegeben durch

$$W = |\langle \chi|\psi \rangle|^2$$

Kommentar zur Notation: Bisher: Bra-Ket nur Notation für Skalarprodut. Aber: Braket universeller einsetzbar: statt

$$\psi, \chi \in \mathcal{H} \rightarrow |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$$

Des weiteren nutzen wi die Notation

$$\langle \psi|, \langle \chi| \in \mathcal{H}^*$$

das heißt $\langle \psi|$ ist ein lineare Funktional auf $\mathcal{H}$

$$\langle \psi| : |\chi\rangle \mapsto \langle \psi|\chi\rangle \in \mathbb{C}$$

Man kann auch schreiben

$$\langle \psi|\chi\rangle \equiv \langle \psi| \, |\chi\rangle$$

Anwendung durch

$$\int \mathrm{d}x \psi^*(x)\chi(x)$$

1.5 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Jetzt $\psi(x) \to \psi(\vec{x}, t)$ Zeitentwicklung! (außerdem $x \to \vec{x}$)

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$$
$$W(V, t) = \int_V \mathrm{d}^3 x \rho(\vec{x}, t) \quad V \subset \mathbb{R}^3$$

Wie sieht die zeitliche Änderung von $\rho(\vec{x}, t)$ aus?

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{x}, t)\right)\psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}t)\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t)\right) = (\psi^*(\vec{x}, t))\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t)\right) + \mathrm{c.\,c.}$$

benutze Schrödingergleichung um $\partial_t \psi(\vec{x}, t)$ zu erhalten

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}, t)$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) = \left(\frac{i\hbar}{2m}\psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - \frac{i}{\hbar}V\psi^*\psi\right) + \mathrm{c.\,c.}$$

Der zweite Term ist rein imaginär $\implies$ kann weggelassen werden

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho(\vec{x}, t)) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\vec{\nabla}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi\right) - (\nabla\psi^*)\left(\vec{\nabla}\psi\right)\right) + \mathrm{c.\,c.} \qquad = \frac{i\hbar}{2m}\left(\vec{\nabla}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi\right) -\right.$$

Man erhält eine Kontinuitäts-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\vec{j} = 0$$

mit Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}$

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\left(\vec{\nabla}\psi^*\right)\psi - \psi^*\left(\vec{\nabla}\psi^*\right)\right)$$

(Wahrscheinlichkeit ist erhalten, so wie zum Beispiel Gesamtmasse einer strömenden Flüssigkeit). Wichtige Rechnung: Integration der Kontinuitätsgleichung über den gesamten Raum, Anwendung von Gauß, Vernachlässigung von Randtermen $\to$ Gesamtwahrscheinlichkeit konstant. Technisch: Haben gezeigt, dass Zeitentwicklung die Norm von $|\psi\rangle$ (des Vektors ψ) respektiert. Geladenes Teilchen: ρ - Ladungsdichte ´/ $\vec{j}$ - Stromdichte. Wichtiger Spezialfall: Ebene Welle

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{x}} \implies \vec{\nabla}\psi = \vec{i}k\psi$$
$$\implies \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}2\left(-i\vec{k}\right)\psi^*\psi = \frac{\vec{p}}{m}\rho = \vec{v} \cdot \rho$$

1.6 Erwartungswert von Observablen

In Quantenmechanik: oft nur Statistische- beziehungsweise Wahrscheinlichkeitsaussagen. Unser Beispiel: Detektionsort des Teilchens auf Schirm des Doppelspaltexperiments. Zur Vereinfachung: Sei Ort diskret: Zahl von Punkten x_i $(i = 1, \ldots, N)$. Bereiten viele Teilchen genau gleich vor, Messung $\implies$ Mittelwert des Ortes:

$$\bar{x} \equiv \frac{\sum_i n_i x_i}{\sum_i n_i}$$

n_i ist Zahl der Versuchen mit Ergebnis x_i. Theorie: Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte

$$\langle x \rangle = \sum_i w_i x_i \quad \text{mit} \quad \sum_i w_i = 1$$

Mittelwert sehr groher Messreihen $\simeq$ Erwartungswert. Quantenmechanik liefert die w_i, in unserem Spielzeugmodell mit diskretem Ort: $w_i = |\psi_i|^2$. Wobei

$$|\psi\rangle \equiv \{\psi_1, \ldots, \psi_n\}^T \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^N$$

Unsere Normierung auf Eins:

$$\sum_i \psi_i^* \psi_i = 1$$

(auf Eins normierter komplexer Vektor). Erwartungswert:

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i w_i = \sum_i x_i \psi_i^* \psi_i$$

Übergang zum Kontinuumsfall ist offensichtlich:

$$\langle x \rangle = \int \mathrm{d}x x \rho(x) = \int \mathrm{d}x \psi^*(x) x \psi(x)$$

x ist hier bewusst in der Mitte $\rightarrow$

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$$

$\hat{x}$ ist hier ein Operator, welcher die komplexe Funktion $\psi(x)$ mit x multipliziert:

$$\hat{x} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}, |\psi\rangle \mapsto \hat{x} |\psi\rangle$$
$$\hat{x} |\psi\rangle : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, x \mapsto x\psi(x)$$

Braket-Notation

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int \mathrm{d}x \psi^*(x)(x\psi(x)) = \int \mathrm{d}x \psi^* x \psi(x)$$

Neue Denk- und Sprechweise: Der Observablen „Ort“ wir der Operator $\hat{x}$ auf $\mathcal{H}$ zugeordnet. Der Erwartungswert der Mepssgröße ist

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$$

Überganz zu $\mathbb{R}^2$

$$\langle \psi | \hat{\vec{x}} | \psi \rangle = \int \mathrm{d}^3 x \psi^*(\vec{x}) \vec{x} \psi(\vec{x})$$

$\hat{\vec{x}}$ 3 Operatoren, zusammengefasst zu einem Vektor. Operator zur Observablen Impuls: $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$. Berechne

$$\langle \psi | \hat{\vec{p}} | \psi \rangle$$

in ebener Welle. Problem: $|\psi\rangle$ für Welle nicht normierbar $\sim$ betrachte stattdessen ein Wellenpaket

$$\rightarrow \psi(\vec{x}) = \int \mathrm{d}^3 k f(k) e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

$f(k)$ konkentriert bei $\vec{k}_0$. Zeigen, dass $\psi(\vec{x})$ normierbar ist:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \psi \rangle &= \int \mathrm{d}^3 x \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \\
&= \int \mathrm{d}^3 x \int \mathrm{d}^3 k f^*\left(\vec{k}\right) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \int \mathrm{d}^3 q f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{x}} \\
&= \int \mathrm{d}^3 k \int \mathrm{d}^3 q f^*\left(\vec{k}\right) f(\vec{q}) \underbrace{\int \mathrm{d}^3 x e^{i\left(\vec{q}-\vec{k}\right)\vec{x}}}_{(2\pi)^3 \delta^3\left(\vec{q}-\vec{k}\right)} \\
&= (2\pi)^3 \delta^3\left(\vec{q} - \vec{k}\right) \int \mathrm{d}^3 k \left| f\left(\vec{k}\right) \right|^2
\end{aligned}$$

Für passendes f kann das offensichtlich endlich sein. Widerhole Rechnung mit $\langle\psi|\hat{\vec{p}}\rangle$. Dies erzeugt Faktor $-i\hbar i\vec{q} = \hbar\vec{q}$.

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{\vec{p}}|\psi\rangle &= (2\pi)^3 \int \mathrm{d}k\hbar\vec{k}\left|f\left(\vec{k}\right)\right|^2 \\ &\approx \hbar\vec{k}_0 \underbrace{(2\pi)^3 \int \mathrm{d}^3k\left|f\left(\vec{k}\right)\right|^2}_{\text{normiert per Annahme}} \\ &\approx \hbar\vec{k}_0\end{aligned}$$

Ort $\to$ Operator $\hat{x}$ (Multiplikation mit x_i)
Impuls $\to$ Operator $-i\hbar\vec{\nabla}$
Energie $\to$ Operator $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2/(2m)+V\left(\hat{\vec{x}}\right), V\left(\hat{\vec{x}}\right)$: Multiplikations-Operator wie $\vec{x}$ beziehungsweise Taylor-Reihe in $\hat{\vec{x}}$

2 Das Zwei-Zustands-System und andere endlichdimensionale Modelle

Problem: $\psi(x)$ mit Operatoren $\hat{x}, \hat{p}$ ist sehr anschlaulich, aber mathematisch kompliziert (wegen $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$).
Deshalb: Toy-Modell (das auch sonst wichtig ist) mit einfachem Hilbert-Raum: („Spin-1/2-System“) Zwei-Zustands-System

2.1 2-und mehr-Zustands-Systeme

Idee: Betrachte System mit nur zwei linear unabhängigen (zum Beispiel unser „diskreter“ Ortsraum oben) Zuständen

$$\psi = \{\psi_1, \psi_2\}^T \in \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$$

Populärstes und praktisch interesanntestes System: Teilchen mit Spin (mit 2 Zuständen); $\psi = \{\psi_1, \psi_2\} \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2$. Konkret:

$$\psi = \alpha\left|\uparrow\right\rangle + \beta\left|\downarrow\right\rangle \leftrightarrow \{\alpha, \beta\}^T \in \mathbb{C}^2$$

Verallgemeinerung $N > 2$:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|1\rangle + \beta\,|2\rangle + \gamma\,|3\rangle \leftrightarrow \{\alpha, \beta, \gamma\}^T \in \mathbb{C}^3$$

(und so weiter für $N > 3$).
Für jedes N ist dieses System (im Sinne von $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$) eindeutig. (Weil es bis auf Isomorphie nur einen endlichdimensionalen Vektorraum zu jedem N gibt). Die Dynamik kann jedoch sehr verschieden sein! ($\to$ viele mögliche $\hat{H}$!)

2.2 Endlichdimensionale komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt

(„endlich dimensionale Hilbert-Räume“). Skalarprodukt

- Begriff Vektorraums ($\to$ Axiome), hier immer über $\mathbb{C}$
- Basis, Dimension = Zahl der Basis-Elemente
- für jedes N (Dimension): Isomorph zu C^N

Die Quantenmechanische Interpretation braucht Skalarprodukt. Das Skalarprodukt ist eine Abbildung

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}, \{\psi, \chi\} \to \langle\psi|\chi\rangle$$

welche im 1. / 2. Argument antilinear / linear und **hermitesch** ($\langle\psi|\chi\rangle^* = \langle\chi|\psi\rangle$) ist. Es folgt: $\langle\psi,\psi\rangle \in \mathbb{R}$. Wir brauchen auch: positiv definit. Ein Skalarprodukt heißt positiv definit, wenn

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \quad \text{und} \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \implies |\psi\rangle = \vec{0}$$

Fakt: In solche Räumen gibt es Orthonormalbasen ($\rightarrow$ Gram-Schmidt-Verfahren). Eine Orthonormalbasis erfüllt

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$$

Falls $|\psi\rangle = \psi^i\,|e_i\rangle$ und $|e_i\rangle$ ortonormal, dann

$$\langle\psi|\chi\rangle = \psi^{*i}\chi^j\delta_{ij} = \vec{\psi}^* \cdot \vec{\chi}$$

Wie schon erwähnt, wollen wir die Notation

$$\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$$

benutzen. $\langle\psi|$ ist definiert durch:

$$\langle\psi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, |x\rangle \mapsto \langle\psi,\chi\rangle$$

Bequem: Denke $|\psi\rangle$ als Spaltenvektor und $\langle\psi|$ als Zeilenvektor in $\mathbb{C}^N$
Kommentar: für $N < \infty$ ist $\mathcal{H}^*$ stets isomorph zu $\mathcal{H}$, aber im Allgemeinen gibt es keine kanonische Abildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$. Aber mit Skalarprodukt gibt se eine: $|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|$.
Nützlich: **Schwarzsche Ungleichung**

$$|\langle\psi|\chi\rangle| \leq \|\psi\|\|\chi\| \qquad \|\chi\| = \sqrt{\langle\chi,\chi\rangle}$$

Herleitung: Betrachte Projektion eines Vektors auf den anderen und vergleiche mit ursprünglichen Vektor

$$|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle}{\|\chi\|}\frac{\langle\chi|\psi\rangle}{\|\chi\|}$$

Betrachte Betragsquadrat

$$\begin{aligned}(\langle\psi| - \frac{\langle\psi|\chi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle}\frac{\langle\psi|}{\langle\chi|c\rangle})\left(|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\frac{\langle\chi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right) &\geq 0 \\ \implies \langle\psi|\psi\rangle - \frac{\langle\chi|\psi\rangle\,\langle\psi|\chi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle} &\geq 0\end{aligned}$$

Fakt: Dreiecksungleichung:

$$\|\psi + \chi\| \leq \|\psi\| + \|\chi\|$$

Herleitung: betrachte

$$\|\psi + \chi\|^2 = \langle\psi + \chi|\psi + \chi\rangle\,(|\psi\rangle + |\chi\rangle) \qquad \text{(Ausmultiplizieren!)}$$

Benutze

$$\langle\psi|\chi\rangle + \langle\chi|\psi\rangle = 2\Re\,\langle\psi|\chi\rangle \leq 2|\langle\psi|\chi\rangle|$$

Dann Benutze Schwarze Ungleichung $\rightarrow$ Rest Übungen.
lineare Abbildung: $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, |h\rangle \mapsto A\,|\psi\rangle$

Definition 2.1

Man kann Operatoren durch „Hintereinanderausführen“ multipliziren:

$$(AB) : |\psi\rangle \times A(B(|\psi\rangle))$$

(entspright in Basis der Matrix Multiplikation). Begriff: Algebra $\equiv$ Vektorraum mit (assoziativer) Multiplikation. (Operatoren auf $\mathcal{H}$ bilden eine Algebra)

2.3 Erste Schritte zur Physik des 2-Zustand-Systems

Erinnerung: $|\psi(x)|^2 \mathrel{\hat{=}}$ „Wahrscheinlichkeit". Hier: x (kontinuierlich) $\to i$ (diskret). Erwarte: $|\psi_i|^2 \mathrel{\hat{=}}$ Wahrscheinlichkeit. Unser $N = 2$ Fall:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$$

Wahrscheinlichkeit entsprechenden Zustand "zu finden"

$$W_\uparrow = |\alpha|^2$$
$$W_\downarrow = |\beta|^2$$

Unter der Vorraussetzung

$$\langle\uparrow\mid\uparrow\rangle = \langle\downarrow\mid\downarrow\rangle = 1, \langle\uparrow\mid\downarrow\rangle = \langle\downarrow\mid\uparrow\rangle = 0$$

Für welche Obervable / Messgröße sind dies die Wahrscheinlichkeiten?
Sagen wir wiRmessen $1/2$ falls $|\uparrow\rangle$ und $-1/2$ falls $|\downarrow\rangle$. Such Operator, der dies realisiert. Dazu Komponenten-Schreibweise

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

und definiere

$$S = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Man rechnet sofort nach:

$$\langle\psi|S|\psi\rangle = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 = \frac{1}{2}W_\uparrow - \frac{1}{2}W_\downarrow$$

Wir sehen: Spin-Messung liefert $1/2$ mit Wahrscheinlichkeit $W_\uparrow = |\alpha|^2$ und $-1/2$ mit Wahrscheinlichkeit $W_\downarrow = |\beta|^2$
Also: Wir haben hier ein weiteres Beispiel für die Grundregel, dass der „Operater zu Bra und Ket" den Erwartungswert einer Messung liefert.
Wichtig: Nach Messung, kennen wir den Zustand under ist **nicht mehr** $\alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$. Erinnerung: Teilchen, Kollaps der Wellenfunktion.
Hier: Wissen nach Messung mit Ergebnis $1/2$, dass $|\psi\rangle = |\uparrow\rangle$. $\implies$ Messprozess beeinzlusst **zwingend** den Zustand.
Genauer: Messung $\hat{=}$ Projektion auf den zum Messwert gehörenden **Eigenvektor des Operators**
Erinnerung: falls $A\,|a\rangle = a\,|a\rangle$, dann sagt man A hat Eigenvektor $|a\rangle$ zum Eigenwert a. Demnach: S hat zwei Eigenvektoren $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ zu $1/2$ und $-1/2$.

$$S\,|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\,|\uparrow\rangle$$
$$S\,|\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\,|\downarrow\rangle$$

Vor Messung:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$$

Nach Messung:

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle \quad \text{oder} \quad |\downarrow\rangle$$

Ein Operator P heißt Projektor, falls $P^2 = P$. Beispiel:

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ist auf $\mathbb{R}^3$ Projektor auf x-y-Ebene. Können S als Linearkombination von Projektionen schreiben:

$$S = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}P_\uparrow - \frac{1}{2}P_\downarrow$$

Also $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \to$ Messung mit Ausgang $1/2 \to P_\uparrow|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle$ Danach: Neu normiern $\mapsto |\uparrow\rangle$. Nützliche Schreibweie für Projektor auf $|\psi\rangle$:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

P_ψ ist als Operator aufzufassen wie folgt:

$$P_\psi : |\chi\rangle \mapsto |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$$

P_ψ ist Projektor:

$$P_\psi^2|\chi\rangle = P_\psi(|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle) = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{\mathbb{1}}\langle\psi|\chi\rangle = P_\psi|\chi\rangle \checkmark$$

$\implies$ Sehr intuitive Schreibweise für S (aber auch allgemein)

$$S = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| - \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|$$

Andere Observable: $\hat{H}$, zum Beispiel

$$H = \begin{pmatrix} E_\uparrow & 0 \\ 0 & E_\downarrow \end{pmatrix}$$

Klarerweise: $\hat{H} = E_\uparrow|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + E_\downarrow|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$. Schrödingergleichung:

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

Allgemeiner Ansatz:

$$|\psi(k)\rangle = \alpha(t)|\uparrow\rangle + \beta(t)|\downarrow\rangle$$
$$i\hbar\Big(\dot{\alpha}|\uparrow\rangle + \dot{\beta}|\downarrow\rangle\Big) = E_\uparrow\alpha|\uparrow\rangle + E_\downarrow\beta|\downarrow\rangle$$

Aufgrund der Eindeutigkeit der Zerlegung in eine Basis erhält man zwei Gleichungen

$$i\hbar\dot{\alpha} = E_\uparrow\alpha$$
$$i\hbar\dot{\beta} = E_\uparrow\beta$$

$\implies$ Lösungen sind Exponentialfunktionen. Zusammenbauen:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(0)e^{-i\frac{E_\uparrow}{\hbar}t}|\uparrow\rangle + \beta(0)e^{-i\frac{E_\downarrow}{\hbar}t}|\downarrow\rangle$$

(Wiedererkennung: $E = \hbar\omega$!). Wichtig: $|\alpha|$ und $|\beta|$ bleiben in Zeitentwicklung konstant. Übergang zum N-dimensionalen System (Hilbert-Raum) offensichtlich: (solange Basis $|i\rangle$ ($i = 1, \dots, N$) von Eigenvektoren von H bekannt)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(0)e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}|i\rangle \qquad H|i\rangle = E_i|i\rangle$$

2.4 Adjungierte und hermitesche Operatoren

$\mathcal{H}$ endlichdimensionaler Hilbertraum, betrachte linearen Operator $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$. Der zu A adjungierte Operator $A^\dagger$ ist durch die Eigenschaft

$$\langle A^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \psi \mid A\chi \rangle$$

Definiert dies tatsächlich einen Operator? Ja weil rechts lineares Funktional auf $\mathcal{H}$ definiert ist. Element von $\mathcal{H}^*$ $\to$ Element von $\mathcal{H}$: dieses ist

$$A^\dagger |\psi\rangle$$

Äquivalente Definition:
Vorbereitung: Definiere Wirkung von beliebigen Operator auf Bra-Vektoren von rechts:

$$A : \mathcal{H}^* \to \mathcal{H}^*, \langle \psi | \mapsto \langle \psi | A$$

Dabei ist $\langle \psi | A \in \mathcal{H}^*$ definiert durch

$$\langle \psi | A : \mathcal{H} \to \mathbb{C}, |\chi\rangle \mapsto \langle \psi | A | \chi \rangle$$

Jetzt definiern wir $A^\dagger$ als den Operator der folgende Aussage wahr macht:

$$A |\psi\rangle = |\chi\rangle \iff \langle \psi | A^\dagger = \langle \psi |$$

In Worten: Wirkung von A von linkts auf $\mathcal{H}$ entspricht (mit kanonischen Isomorphismus) der Wirkung von $A^\dagger$ von rechts auf $\mathcal{H}^*$.
Jetzt: Übersetzung in Matrixsprache. Dazu: Orthonormalbasis $|e_i\rangle = |i\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$$

Behauptung: Die oben definierten Komponenten ψ_i gewinnt man als

$$\psi_i = \langle i | \psi \rangle$$

Nachrechnen durch Projektion von

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$$

auf $\langle j |$:

$$\langle j | \psi \rangle = \langle j | \sum_i \psi_i |i\rangle \rangle = \sum_i \psi_i \delta_{ij} = \psi_j \checkmark$$

Behauptung: Jeder Operator entspricht Matrix:

$$A \leftrightarrow A_{ij} = \langle i | A | j \rangle$$

Bazu: Bestimme Komponenten von $A |\psi\rangle$:

$$\langle i | A | \psi \rangle = \langle i | A \sum_j |j\rangle \psi_j = \underbrace{\sum_j A_{ij} \psi_j}_{\text{Matrix } (A_{ij}) \text{ mal Spaltenvektor } \{\psi\}^T}$$

Jetzt zurück zur Definition von $A^\dagger$:

$$\langle A^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \psi | A | \chi \rangle$$

Werte dies auf für $|\psi\rangle = |l\rangle\,, |\chi\rangle = |k\rangle$ (Basisvektoren). Zunächst:

$$
\begin{aligned}
A^\dagger |\psi\rangle &= \left(A^\dagger\right)_{ij} \psi_j |i\rangle = \left(A^\dagger\right)_{ij} \delta_{lj} |i\rangle = \left(A^\dagger\right)_{il} |i\rangle \\
\langle A^\dagger \psi | \chi\rangle &= \left(A^\dagger\right)^*_{il} \langle i|k\rangle \left(A^\dagger\right)^*_{kl} = \langle\psi|A|\chi\rangle = \langle l|A|k\rangle = A_{lk} \\
\implies \left(A^\dagger\right)_{ij} &= A^*_{ji} \iff A^\dagger = (A^*)^T
\end{aligned}
$$

Ab sofort $\hat{A}^\dagger \equiv$ adjungierter Operator. $A^\dagger \equiv$ „adjungierter“ beziehungsweise „hermitesch konjugiertee Matrix“.

Definition 2.2 Auf endlich dimensionalen Hilbertraum heißt Operator $\hat{A}$ hermitesch, falss

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

(entspricht hermitescher Matrix $A^\dagger = A$)

Wichtig für Quantenmechanik: hermitesche Operatoren haben reelle Erwartungswerte $\implies$ Nutze diese zur Beschreibung von Observablen. Nutze zweite Definition:

$$
\begin{aligned}
A|\psi\rangle = |\chi\rangle &\iff \langle\psi| A^\dagger = \langle\chi| \\
\implies \langle\rho|A|\psi\rangle &= \langle\rho|\chi\rangle \\
\langle\psi|A^\dagger|\rho\rangle &= \langle\chi|\rho\rangle \\
\implies \langle\rho|A|\psi\rangle^* &= \langle\psi|A^\dagger|\rho\rangle
\end{aligned}
$$

Benutze nun $A = A^\dagger$ und setze $|\rho\rangle \equiv |\psi\rangle$

$$\implies \langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

2.5 Eigenwerte, Diagonalisierbarkeit, unitäre Operatoren

$|\psi\rangle$ heißt Eigenvektor zu A falls

$$
\begin{aligned}
\hat{A}|\psi\rangle &= \lambda|\psi\rangle \\
\iff A_{ij}\psi_j &= \lambda\psi_i
\end{aligned}
$$

> Entscheidend: hermitesche Operatoren haben stets Basis aus Eigenvektoren. ($\rightarrow$ sind als Matrizen in dieser Basis diagonal)

Herleitung: Kapitel 3.3 von Theo 2. Idee: Sei $\hat{H}$ der hermitesche Operator, sei H die entsprechende Matrix. Löse $\det(H - \lambda\mathbb{1}) = 0$. Sei λ_1 Lösung. Löse Gleichung $(H - \lambda_1\mathbb{1})x = 0 \implies$ Lösungsvektor x_1. Zeige, dass H das orthogonale Komplement von x_1 auf sich selbst abbildet und auf diesem hermitesch ist. Widerhole Argument oben, finde λ_2, x_2 und so weiter und so fort. $\implies$ Basis $\{|\lambda_i\rangle\}$ mit Eigenwerten λ_i. Zerlege neue Basis in alte Basis:

$$|\lambda_i\rangle = |j\rangle\, U_{ji}$$

Berechne

$$\delta_{ij} = \langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = U^*_{ki}\langle k|l\rangle\, U_{lj} = U^*_{ki}U_{kj} = \left(U^\dagger\right)_{ik} U_{kj} = \left(U^\dagger U\right)_{ij}$$

Dies definiert gerade eine **unitäre Matrix**:

$$U^\dagger = U^{-1}$$

Wir benutzen die gleiche Definition für einen **unitären Operator**:

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

Entscheidende Eigenschaft des unitären Operators: **Kompatibilität mit Skalarprodukt**: betrachte unitären Operator $\hat{O}$

$$\langle \hat{O}\psi | \hat{O}\chi \rangle = \langle \psi | \hat{O}^\dagger \hat{O} | \chi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle$$