

6) Formale Grundlagen der Quantenmechanik

(26)

Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ ist eine "spezielle" Darstellung eines quantenmech. Zustandes.

Ziel: Beschreibe Zustand $|\Psi\rangle$ (im Allg. $|\Psi(t)\rangle$)

als Vektor in einem Vektorraum der Zustände, auch Hilbert-Raum $\mathcal{H}$.

$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$: Beispiel $\Psi(x,t) \in$ Raum der quadratintegrierbaren Funktionen

Hilbert-Raum: (∞ -dimensionaler) Vektorraum über dem Körper der reellen oder komplexen Zahlen mit Skalarprodukt und der Möglichkeit eine Basis zu definieren.

2 Verknüpfungen: $|\Psi\rangle \oplus |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \forall |\Psi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$
 $c \odot |\Psi\rangle \oplus d \odot |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad c, d \in \mathbb{C}$

Eigenschaften: (i) Neutrales Element:

$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$
 Neutrales Element bzgl. in $\mathbb{C}$ Neutrales Element aus $\mathcal{H}$, Nullvektor

Einsclement aus $\mathbb{C} \rightarrow 1 \cdot |\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$

Es gilt: $0 \cdot |\alpha\rangle = |0\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$
 Neutrales Element bzgl. + in $\mathbb{C}$ $c \cdot |0\rangle = |0\rangle \quad \forall c \in \mathbb{C}$

(ii) Inverses Element:

$|\alpha\rangle - |\alpha\rangle = |\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle$

Definition Skalarprodukt:

$\langle \alpha | \beta \rangle \in \mathbb{C}$

Dirac-Notation

bra-Vektor (aus dem Dualraum)

ket-Vektor $\rightarrow$ "bra-ket" [bracket]

Beispiele für Hilbert-Räume und Skalarprodukte:

$\mathbb{R}^3$ mit Standard-Skalarprodukt $\langle \alpha | \beta \rangle = \vec{\alpha}^T \vec{\beta}$

• Raum der quadratintegrierbaren Funktionen $\langle \Psi | \Psi \rangle = \int dx \Psi^*(x) \Psi(x)$

Eigenschaften des Skalarprodukts: $\langle \alpha | \beta \rangle^* = \langle \beta | \alpha \rangle$

$\langle \alpha | \beta + \gamma \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \alpha | \gamma \rangle$

$\langle \alpha | c_1 \beta + c_2 \gamma \rangle = c_1 \langle \alpha | \beta \rangle + c_2 \langle \alpha | \gamma \rangle$

$\langle c_1 \alpha + c_2 \beta | \gamma \rangle = c_1^* \langle \alpha | \gamma \rangle + c_2^* \langle \beta | \gamma \rangle$ (antilinear in Bezug auf ersten Faktor)

$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$ (positiv definit)

Man definiert die Norm nach $\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ und Orthogonalität von $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ gemäß $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

b) Basis im Hilbert-Raum (*)

27

Gegeben sei eine Basis $|u\rangle$ (möglicherweise unendlich dimensional!)

mit orthogonalen Vektoren $\langle u|u\rangle = \delta_{uu}$, an besten mit $\|u\|=1$.

Dann: Jeder Zustand $|\Psi\rangle$ darstellbar durch Angabe der Projektionen auf $|u\rangle$

$$c_u = \langle u|\Psi\rangle \quad (\text{vgl. Entwicklung nach stationären Zuständen 5f})$$

$$\rightarrow |\Psi\rangle = \sum_u |u\rangle c_u = \sum_u |u\rangle \langle u|\Psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \text{Vollständigkeitsrelation der Basis} \quad \sum_u |u\rangle \langle u| = \mathbb{1}$$

Beispiele und Anmerkungen:

(i) Vergleich 3-dim. Raum: $\vec{r} = \sum_i (\vec{r} \cdot \vec{e}_i) \vec{e}_i \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \vec{r} \cdot \vec{e}_1 \\ \vec{r} \cdot \vec{e}_2 \\ \vec{r} \cdot \vec{e}_3 \end{pmatrix}$

Komponentenvektor bei vorgegebener Basis!

(ii) Ortsraumdarstellung: $\psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$

Eigenfunktionen des Ortsoperators bilden Basis!

Skalarprodukt im Ortsraum: $\psi(x) = \int dx' \underbrace{\delta(x-x')}_{=|x'\rangle!} \psi(x')$

kont. Spektrum

(iii) Impulsraumdarstellung: $\phi(p) = \langle p|\Psi\rangle$

Eigenfunktionen des Impulsoperators bilden Basis!

Skalarprodukt und Impulseigenzustände im Ortsraum:

$$\phi(p) = \int dx \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}}_{=|p\rangle!} \psi(x)$$

$\Leftrightarrow$ Fouriertransformation!

Hierbei haben wir benutzt:

$$\langle \psi|\psi\rangle = \sum_u \langle \psi|u\rangle \langle u|\psi\rangle$$

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

$\Leftrightarrow$ kontinuierliches Spektrum,

z.B. für Ortsoperator!

$\rightarrow$ Wellenfunktion ist $\psi(\vec{r})$ ist eine Darstellung des Zustandes $|\psi\rangle$ in der Basis der Zustände des Ortsoperators!

! ist basis-unabhängig!

Die Dirac-Notation mit $\langle \psi|$ und $|\psi\rangle$ ist basis-unabhängig!

$\rightarrow$ Entwicklung in z.B. Eigenzuständen eines hermiteschen Operators liefert eine konkrete Darstellung.

* Elemente $|u\rangle$ bilden eine Basis, wenn $\sum c_u |u\rangle = |0\rangle$ nur über $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ erreicht werden kann (lineare Unabhängigkeit).

c) Operatoren im Hilbert-Raum

Lineare Operator $\hat{A}$ ordnet jedem $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ ein $|\beta\rangle \in \mathcal{H}$ zu.

Linearität: Für alle $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$, $a \in \mathbb{C}$ gilt:

$$\hat{A}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{A}|\beta\rangle$$

$$\hat{A}(a|\alpha\rangle) = a\hat{A}|\alpha\rangle$$

Definition Matrixelement von $\hat{A}$:

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle := \langle \alpha | (\hat{A}|\beta\rangle) \quad \text{Skalarprodukt von } \langle \alpha | \text{ mit } \hat{A}|\beta\rangle$$

Definition des adjungierten Operators $\hat{A}^\dagger$:

$$\hat{A} \text{ linearer Operator} \rightarrow \exists \hat{A}^\dagger, \text{ so dass } \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle^*$$

$$\text{Dies impliziert: } \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \beta \rangle = \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \beta \rangle \xrightarrow{\uparrow} \langle \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle^* = \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle^*$$

$$\text{Somit: } \langle \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A} \quad \xrightarrow{\text{Eigenschaft Skalarprodukt}} \text{Auf "bra"-Vektoren wirkt } \hat{A}^\dagger!$$

$$\text{Eigenschaften: } \left. \begin{aligned} (a\hat{A})|\alpha\rangle &= a(\hat{A}|\alpha\rangle) \\ (\hat{A} + \hat{B})|\alpha\rangle &= \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{B}|\alpha\rangle \end{aligned} \right\} \text{Linearität!}$$

$$\text{Kommutator: } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \text{Reihenfolge!}$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

Jacobi-Identität:

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

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger, \text{ denn}$$

$$\langle (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A}\hat{B} | \beta \rangle = \langle \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle \langle \hat{B} | \beta \rangle = \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \beta \rangle$$

d) Hermitesche Operatoren / Vollständiger Satz von Observablen

(i) Eigenzustände und Eigenwerte von hermiteschen Operatoren

Selbstadjungierter / hermitescher Operator: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

$$\text{Eigenwertproblem: } \hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \quad \uparrow \text{ in Allg. } \in \mathbb{C}$$

$$\text{Für } \hat{A}^\dagger = \hat{A} \text{ gilt: } \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle^*$$

$$\rightarrow a \langle \alpha | \alpha \rangle = a^* \langle \alpha | \alpha \rangle^* = a^* \langle \alpha | \alpha \rangle \rightarrow a = a^*$$

$\rightarrow$ reelle Eigenwerte a !

Die Eigenvektoren bilden ein Orthonormalsystem:

$$a_m \langle n | m \rangle = \langle n | \hat{A} | m \rangle = \langle m | \hat{A}^\dagger | n \rangle^* = \langle m | \hat{A} | n \rangle^* \quad \text{②⑨}$$

$$= a_n^* \langle m | n \rangle^* \stackrel{\substack{\uparrow \\ \hat{A}^\dagger = \hat{A}}}{=} a_n \langle n | m \rangle$$

$$\rightarrow (a_n - a_m) \langle n | m \rangle = 0 \quad \xrightarrow{\substack{\uparrow \\ \text{an reell}}} \langle n | m \rangle = \text{Sum!}$$

Anmerkung: Falls Entartung bzgl. eines Eigenwertes vorliegt, können die Eigenvektoren des Unterraumes orthogonalisiert werden.

$\rightarrow$ Eigenvektoren bilden ein Orthonormalsystem!

(ii) Vertauschbarkeit und simultane Eigenvektoren

Satz von hermiteschen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$

* Sei $|n\rangle$ ein vollständiges System von Eigenvektoren von $\hat{A}$ und $\hat{B}$:

$$\hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle, \quad \hat{B}|n\rangle = b_n |n\rangle$$

$$\rightarrow [\hat{A}, \hat{B}]|n\rangle = \underbrace{\hat{A}\hat{B}|n\rangle}_{b_n |n\rangle \hookrightarrow \in \mathbb{R}} - \underbrace{\hat{B}\hat{A}|n\rangle}_{a_n |n\rangle \hookrightarrow \in \mathbb{R}} = (a_n b_n - a_n b_n) |n\rangle = 0$$

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

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

Diskussion des Falles ohne ~~Entartung~~ Entartung: $\hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle$

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

$\rightarrow$ Auch $\hat{B}|n\rangle$ ist demnach Eigenvektor von $\hat{A}$ zum selben Eigenwert a_n

Wegen Nichtentartung muss $\hat{B}|n\rangle \propto |n\rangle$ gelten, also $\hat{B}|n\rangle = b_n |n\rangle$

Somit: $|n\rangle$ simultaner Eigenvektor von $\hat{A}$ und $\hat{B}$

Damit: Hermitesche Operatoren, die vertauschen, haben ein gemeinsames System von Eigenvektoren!

$\rightarrow$ Observable gleichzeitig ohne Unsicherheit meßbar!

Anmerkung: Im Falle von Entartung eines Eigenwertes bei z.B. $\hat{A}$, kann diese Entartung mittels eines zweiten Operator $\hat{B}$ mit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ aufgelöst werden. Man spricht dann von einem vollständigen Satz von Observablen $\hat{A}$ und $\hat{B}$.

e) Postulate der Quantenmechanik

30

(i) Zustandsraum eines Systems ist ein Hilbert-Raum $\mathcal{H}$.

Ein Zustand wird durch ein Element $|\psi(t_0)\rangle$ in $\mathcal{H}$ beschrieben.

(ii) Observable werden beschrieben durch lineare, selbstadjungierte (hermitesche) Operatoren im Zustandsraum. deren Eigenwerte sind die möglichen Meßwerte!

(iii) Meßprozeß: Resultat einer Messung einer physikalischen Größe, ist einer der Eigenwerte des zugehörigen Operators $\hat{A}$: Meßwert!

Meßwahrscheinlichkeiten:

x Nicht-entartetes diskontinuierliches Spektrum: $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$

$$\text{Dann: } |\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$|n\rangle$ bilden Orthonormalsystem!

→ Wahrscheinlichkeit $\neq a_n$ zu messen:

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

x Entartetes diskontinuierliches Spektrum:

$$\hat{A}|n^i\rangle = a_n|n^i\rangle$$

→ mehrere Eigenvektoren zu einem Eigenwert!

→ Entartungsgrad g_n !

$$\text{Dann: } |\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |n^i\rangle$$

$$\rightarrow P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle n^i|\psi\rangle|^2$$

x Kontinuierliches Spektrum:

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$$

$$\rightarrow |\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |\alpha\rangle$$

$$\rightarrow \text{Wahrscheinlichkeitsdichte } dP(\alpha) = |\langle \alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha$$

(iv) Reduktion des Wellenpakets / Kollaps der Wellenfunktion

Nach der Messung ist das System im Eigenzustand des gemessenen Eigenwerts!

→ Meßprozeß beeinflusst ein quantenm. System!

(v) Zeitentwicklung durch die Schrödingergleichung

vgl. Entwicklung nach stationären Zuständen

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

Anmerkung zu (v):

bisher: Schrödinger-Bild $|\psi_S(t)\rangle$ zeitunabhängig gemäß Schrödingergl. / $\hat{A}_S$ fixiert $-i\hbar E t$

$$\text{also: } \langle \hat{A}_S \rangle_t = \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(0) | U^\dagger \hat{A}_S U | \psi_S(0) \rangle$$

$$= \langle \psi_S(0) | U U^\dagger \hat{A}_S U U^\dagger | \psi_S(0) \rangle = \langle \psi_S(0) | U^\dagger \hat{A}_H(t) U | \psi_S(0) \rangle$$

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

wegen $|\psi_S(t)\rangle = U | \psi_S(0) \rangle$

alternativ: Heisenberg-Bild $|\psi_H\rangle$ zeitunabhängig / $\hat{A}_H(t)$ zeitabhängig

$$\rightarrow \text{Heisenberg'sche Bewegungsgl.: } \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{A}_H(t)]$$

→ vgl. Mechanik!