

3) Allgemeine Formulierung der Quantenmechanik

Notiztitel

01.11.2006

3.1 Der Hilbert Raum = $\mathcal{H}$

Dirac-notation: $\psi_\alpha \Rightarrow |\alpha\rangle$ ein Zustandsvektor "ket"
 $\psi_\alpha^\dagger \Rightarrow \langle\alpha|$ ein Zustandsvektor "bra"

- abgeleitet vom Wort $\langle\alpha| \hat{C} |\alpha\rangle$

bra-C-ket $\equiv$ Klammer

a) $\mathcal{H}$ ist ein komplexer, linear Vektorraum:

$$\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$$

gilt:



$$\bullet |\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$$

, wobei $a, b \in \mathbb{C}$

Kurznotation: $|a\rangle = a|\alpha\rangle$ und $\langle a| = a^* \langle\alpha|$

$$\bullet \text{ Addition ist kommutativ: } |\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$$

$$\bullet \exists \text{ Nullelement } |0\rangle: |\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle$$

$$\bullet \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, \exists \text{ inverse } |-\alpha\rangle: |\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle$$

$\Rightarrow$ Diese Eigenschaften sind äquivalent zum **Superpositionsprinzip**

Zustände $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle$ sind linear unabhängig,

falls: $\sum_n a_n |\alpha_n\rangle = |0\rangle$

nur für $a_1 = a_2 = \dots = 0$ möglich ist.



b) $\mathcal{H}$ ist unitär

Es gibt ein Skalarprodukt:

$\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ definieren wir eine komplexe Zahl: $\langle \alpha | \beta \rangle$ mit (α, β)

$$\bullet \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

$$\bullet \langle \alpha | \beta + \gamma \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \alpha | \gamma \rangle \quad \forall |\gamma\rangle \in \mathcal{H}$$

$$\bullet \langle \alpha | c\beta \rangle = c \langle \alpha | \beta \rangle = \langle c^* \alpha | \beta \rangle$$

$$\bullet \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \quad \langle \alpha | \alpha \rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle$$

Orthogonalität: $\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle \perp |\beta\rangle$

def: die Norm eines Zustandes $|\alpha\rangle$ ist definiert als:

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$$

• Dreiecksungleichung:

$$\|\alpha + \beta\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$$

• Schwarz'sche Ungleichung

$$|\langle \alpha | \beta \rangle| \leq \|\alpha\| \cdot \|\beta\| \quad \text{oder} \quad |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle$$

c) $\mathcal{H}$ ist separabel

$\exists M \subset \mathcal{H}$ - abzählbare Menge von Zuständen $|\alpha_n\rangle \in M$

$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, \forall \varepsilon > 0, \exists |\alpha_n\rangle \in M$ mit $\|\alpha_n - \alpha\| < \varepsilon$

d) $\mathcal{H}$ ist vollständig

Für jede Cauchy Folge $\{|\alpha_n\rangle\} \in \mathcal{H}$ gilt:

$$|\alpha_m\rangle, |\alpha_n\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow \|\alpha_n - \alpha_m\| \rightarrow 0 \text{ für } n, m \rightarrow \infty$$

$$\exists |\alpha\rangle \rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} |\alpha_n\rangle = |\alpha\rangle$$

def: Ein Hilbertraum ist ein unitärer Vektorraum, der bezüglich der Norm vollständig ist $\langle \alpha | \beta \rangle$

$\Rightarrow$ existiert eine Orthonormalbasis von Zuständen $\{|\phi_n\rangle = |n\rangle\}$

$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad |\alpha\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n | \alpha \rangle}_{c_n} |n\rangle \equiv \sum_n c_n |n\rangle$$

Parseval: $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad \|\alpha\|^2 = \sum_n |\langle n | \alpha \rangle|^2$

Dirac-Notation:

$$\psi_\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \rightarrow |\alpha\rangle \quad \text{dualer } \psi_\alpha^\dagger = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots) \rightarrow \langle \alpha |$$

Skalarprodukt:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad |\beta\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \alpha | \beta \rangle = \alpha_1^* \beta_1 + \alpha_2^* \beta_2 + \dots$$

$\exists$ VONS: $|n\rangle$

- $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$
- $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$

$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad |\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha \rangle$

ON "Darstellung der Eins"-V

Ortsraum- & Impulsraum-Darstellung

 $|\vec{r}\rangle \rightarrow$ Teilchen am Ort $\vec{r}$ $|\vec{p}\rangle \rightarrow$ Teilchen mit Impuls $\vec{p}$

VONS: $\{|\vec{r}\rangle, \vec{r} \in \mathbb{R}^3\}$

$\{|\vec{p}\rangle, \vec{p} \in \mathbb{R}^3\}$

$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

Die Eins entspricht:

$$\hat{1} = \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|$$

$\forall |\psi\rangle: \langle \vec{r} | \psi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \psi(\vec{r}) \quad \text{- Ortsraum-Wellenfunktion}$

$\langle \vec{p} | \psi \rangle \equiv \tilde{\psi}(\vec{p}) \quad \text{- Impulsraum}$

$$|\psi\rangle = \int d^3r \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\langle \vec{r} | \psi \rangle} |\vec{r}\rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\tilde{\psi}(\vec{p})}_{\langle \vec{p} | \psi \rangle} |\vec{p}\rangle$$

Der Basiswechsel entspricht der (Fourier)transformation:

$$|\vec{p}\rangle = \int d^3r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle |\vec{r}\rangle$$

wobei $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ - die Transformationsmatrix:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3r \underbrace{\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle}_{\text{FT}} \underbrace{\langle \vec{r} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r})} = \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r})$$

woraus folgt das

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad \text{und} \quad \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

Diskrete $|n\rangle$ &

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$$

Kontinuierliche $|\vec{r}\rangle$

$$\langle \vec{r}|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \hat{1}$$

Beispiel: SG: ∞ -Potentialtopf
($L=2$)

$$\langle x|\psi\rangle = \psi_n(x) = \sin\left(\frac{\pi n}{2}x\right) \quad - \text{VONS}$$

$$\{\psi_n = |n\rangle\} \rightarrow \mathcal{H}: \psi: 0 \leq x \leq 2$$

$$\langle n|n'\rangle = \int dx \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) = \int dx \sin\left(\frac{\pi n}{2}x\right) \sin\left(\frac{\pi n'}{2}x\right) = \delta_{nn'}$$

$$\forall \psi: \psi(x) = \begin{cases} x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 2-x, & 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$$

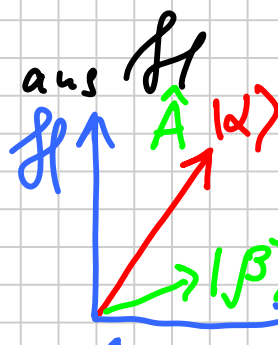
$$\psi \in \mathcal{H} \rightarrow |\phi_m\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi^2 (2k+1)^2} |2k+1\rangle$$

ψ_{2k+1}

$$|\psi\rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} |\phi_m\rangle$$

3.2 Lineare Operatoren in $\mathcal{H}$

- Ein Operator $\hat{A}$ ordnet einem Zustand aus $\mathcal{H}$ einen neuen Zustand in $\mathcal{H}$ zu:



$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad \hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle, \quad |\beta\rangle \in \mathcal{H}$$

$$\text{wobei } |\alpha\rangle \in \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$$

- Definitionsbereich von $\hat{A}$

$$|\beta\rangle \in \mathcal{W}_A \subset \mathcal{H}$$

- Wertbereich von $\hat{A}$

- Operator $\hat{A}$ ist linear, falls gilt:

$$\hat{A}(a_1|\alpha_1\rangle + a_2|\alpha_2\rangle) = a_1\hat{A}|\alpha_1\rangle + a_2\hat{A}|\alpha_2\rangle$$

für $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle \in \mathcal{H}$, $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$

- $\hat{A}^\dagger$: adjungierter Operator

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \beta | \alpha \rangle \quad \text{oder} \quad \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \beta \rangle^*$$

"Wirkung nach Links" $\rightarrow \langle \beta | \hat{A} = \sum_n \langle \beta | \hat{A} | n \rangle \langle n |$

- hermitesch: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

- Produkt: $(\hat{A} \cdot \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$

- Kommutator: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, $[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger]$

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

- Funktion: $f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n$

Beispiel: $e^{\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!} \hat{A}^n$

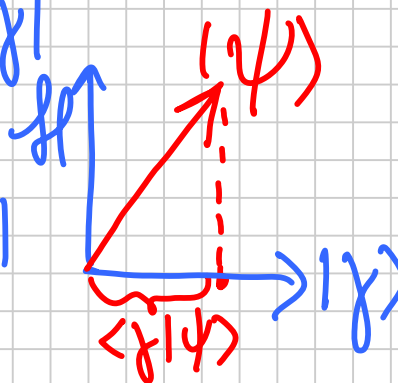
- Baker-Hausdorff:

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$$

wenn $[\hat{A}, \hat{B}]$ mit $\hat{A}, \hat{B}$ kommutiert: (oder $[\hat{A}, \hat{B}] \in \mathbb{C}$)

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]}$$

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

- Projektionsoperator $\hat{P}_\gamma = |\gamma\rangle\langle\gamma|$
 $\hat{P}_\gamma |\psi\rangle = |\gamma\rangle\langle\gamma|\psi\rangle$
 wenn $\langle\gamma|\gamma\rangle = 1 \Rightarrow \hat{P}_\gamma^2 = \hat{P}_\gamma$


- VONS: $\{|n\rangle\}$: $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$
 $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$

$\hat{A} \Rightarrow$ Matrizen darstellen.

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n| \hat{A} |m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} A_{nm} |n\rangle\langle m|$$

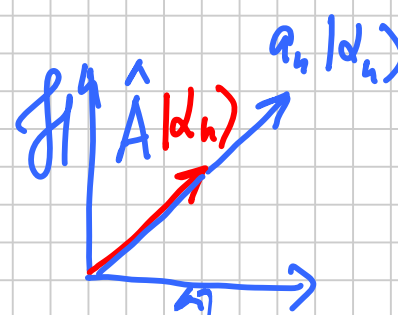


wobei $A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$ - Matrixelement

der adjungierte Operator:

$$\hat{A}^\dagger = \sum_{n,m} A_{mn}^* |n\rangle\langle m|$$

$A =$ hermitesch: $(A^\dagger)_{nm} = A_{mn}^*$

- Eigenzustände & Eigenwerte $\hat{A}|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$


$|\alpha_n\rangle$ ist Eigenzustand des linearen Operators $\hat{A}$
 mit Eigenwert $a_n \in \mathbb{C}$

Falls $\hat{A}^\dagger = \hat{A} \Rightarrow a_n = a_n^* - \text{Reell}$
 $\langle \alpha_n | \alpha_m \rangle = \delta_{nm} \quad (a_n \neq a_m)$
 $a_n = a_m = \dots$ Entartet $\Rightarrow$ orthogonaler,
 $\{|\alpha_n\rangle\} - \text{VONS}$

Falls zwei hermitesche Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ kommutieren.
 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \xRightarrow{\text{dann}}$ besitzen sie ein gemeinsames **VONS**
 $\hat{A}|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$
 $\hat{B}|\alpha_n\rangle = b_n|\alpha_n\rangle$
 $\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{B}\hat{A}|\alpha_n\rangle = \hat{A}\hat{B}|\alpha_n\rangle = a_n b_n |\alpha_n\rangle$

• Spektraldarstellung: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|$$

Erwartungswert, $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n a_n |\langle n | \psi \rangle|^2$$

Beispiel: $\hat{H}$ - Hamiltonoperator ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$)

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

$$\rightarrow \hat{H} = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|$$

$\{|n\rangle\} - \text{VONS (stationäre Zustände)}$

Green'sche Funktion von $\hat{H}$

$$\vec{\nabla}^2 = \hat{\Delta} \Rightarrow (\hat{\Delta} - k^2) G(\vec{r}, \vec{r}', k^2) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (ED)$$

$$QM: (\hat{H} - E) G(E) = -\hat{1} \Rightarrow \hat{G} = (E - \hat{H})^{-1}$$

Spektraldarstellung: $\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E - E_n + i\eta}$

Orts: $G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r} | \hat{G}(E) | \vec{r}' \rangle = \sum_n \frac{\langle \vec{r} | n \rangle \langle n | \vec{r}' \rangle}{E - E_n + i\eta}$

• Ortsraum- und Impulsraum-Darstellung.

Ortsraum: VONS $\{|\vec{r}\rangle\}$ - zu Operator $\hat{r}$
 $\hat{r}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$

Spektraldarstellung: $\hat{r} = \int d^3r \vec{r} |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|$

Impulsraum: VONS $\{|\vec{p}\rangle\}$ - Operator $\hat{p}$
 $\hat{p}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$

Spektraldarstellung: $\hat{p} = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|$

Erwartungswert: des Operators $\hat{r}$ für den Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | \hat{r} | \psi \rangle = \int d^3r \int d^3r' \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{r} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = \int d^3r \vec{r} |\psi(\vec{r})|^2$$

Input:

$$\int d^3r' \langle \vec{r} | \hat{r} | \vec{r}' \rangle = \int d^3r' \vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \vec{r}$$

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int d^3r \int d^3r' \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{p} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \vec{r} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} | \hat{p} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Impulsraum:

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2$$

3.3 Dichtematrix quantenmechanischer Systeme

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp} \{ \hat{\rho} \cdot \hat{A} \} \quad \hat{\rho} - \text{Dichtematrix}$$

- Für einen **reinen** Zustand $|\psi\rangle$

def:

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \text{Sp} \{ \hat{\rho} \cdot \hat{A} \} = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | n \rangle = \\ &= \sum_{n,m} \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{\psi_n} \underbrace{\langle \psi | m \rangle}_{\psi_m^*} \underbrace{\langle m | \hat{A} | n \rangle}_{\sum_m \rightarrow 1} = \sum_{n,m} \psi_m^* A_{mn} \psi_n = \\ &= \sum_{n,m} \underbrace{\langle \psi | m \rangle}_{\psi_m^*} \underbrace{\langle m | \hat{A} | n \rangle}_{\sum_m \rightarrow 1} \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{\psi_n} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Eigenschaften: (Dichtematrix für reine Zustände)

- $\text{Sp}(\hat{\rho}) = 1$
- $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$
- $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

- Für einen **gemischten** Zustand: ($\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$)

Wir betrachten eine Mischung der Zustände im Satz $\{|\psi_n\rangle\}$

Der Erwartungswert von $\hat{A}$ für einen gemischten Zustand ist:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n P_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \quad (0 \leq P_n \leq 1)$$

wobei P_n - die Wahrscheinlichkeit, dass der reine Zustand $|\psi_n\rangle$ vorkommt

$$\sum_n P_n = 1$$

def: $\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ ($\sum_n p_n = 1$)

Eigenschaften:

- $\text{Sp}(\hat{\rho}) = 1$
- $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$
- $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

$\rightarrow \text{Sp}(\hat{\rho}^2) \leq 1$

VONS $\{|k\rangle\}$;
 $\text{Sp} \hat{\rho}^2 < 1$

$$\begin{aligned} \text{Sp} \hat{\rho}^2 &= \sum_{k,n,m} p_n p_m \langle k | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | k \rangle = \\ &= \sum_{k,n,m} p_n p_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | k \rangle \langle k | \psi_n \rangle = \\ &= \sum_{n,m} p_n p_m |\langle \psi_n | \psi_m \rangle|^2 < \sum_n p_n \sum_m p_m = 1 \end{aligned}$$

$\nabla 1$ (mindestens zwei verschiedene ψ)

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

$$0 = \langle \hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle^* = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) - \text{Sp}(\hat{A}^\dagger \hat{\rho}^\dagger) = \text{Sp}[(\hat{\rho} - \hat{\rho}^\dagger) \hat{A}] = 0$$

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ $\forall \hat{A} \rightarrow \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

Gemischter Zustand (R. Feynman)

$$|\psi\rangle = \sum_{n,i} C_{ni} |n\rangle |i\rangle$$

$$\sum_{n,i} |C_{ni}|^2 = 1$$

Hilbertraum $|n\rangle$

System
 $\hat{A} \rightarrow |n\rangle$

Uni: $|\psi\rangle$
 $|i\rangle$

$$\hat{A} |n\rangle |i\rangle = (\hat{A} |n\rangle) |i\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle n | \hat{A} | m \rangle = \\ &= \sum_{n,m,i} c_n^* c_{mi} \langle n | \hat{A} | m \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm} = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A})\end{aligned}$$

δ_{ij}

mit: $\rho_{mn} = \sum_i c_{mi} c_{ni}^*$ - hermitisch!

VONS:

$$\begin{aligned}\hat{\rho} |n\rangle &= P_n |n\rangle \\ \hat{\rho} &= \sum_n P_n |n\rangle \langle n|\end{aligned}$$

Wenn: $P_n = \begin{cases} 1, & \text{für } n=k \\ 0, & \text{für } n \neq k \end{cases} \Rightarrow$ reiner Zustand $|k\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= |k\rangle \langle k| \\ \hat{\rho}^2 &= \hat{\rho}\end{aligned}$$

3.4 Postulate der Quantenmechanik (Hilbertraum)

Physikalisches System
Atom-Teilchen
Observable




Hilbertraum $\mathcal{H}$
 $|\psi\rangle$ Zustände
Hermitesche Operatoren



P1. Jeder (reine) Zustand eines QM-Systems wird durch ein Element $|\psi\rangle$ des Hilbertraums $\mathcal{H}$ beschrieben

P2. Den Observablen entsprechen hermitesche Operatoren z.B. $\hat{p}$

P3. Der Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$ einer Observablen $\hat{A}$ in einem gegebenen Zustand $|\psi\rangle$ wird durch das Skalarprodukt $\langle \psi | \psi' \rangle$ definiert, wobei $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, d.h.:

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

P4. Die Zeitentwicklung der Zustände $|\psi(t)\rangle$ wird durch den Hamilton-Operator $\hat{H}$ bestimmt:
Schrödingergleichung (SG):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{oder} \quad i\hbar |\dot{\psi}\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

für ein Teilchen: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}, t)$

SG können in jedem VONS definiert werden
z. B. in Ortsraum $\rightarrow$ multiplizieren mit $\langle \vec{r} |$

P5. Falls bei einer Messung der Observablen $\hat{A}$ der Eigenwert a_n gemessen wurde dann geht der Zustand des Systems in den entsprechenden Eigenzustand $|\alpha_n\rangle$ über.
Es können für einen Operator $\hat{A}$ nur die Eigenwerte als Messergebnis auftreten. Die Wahrscheinlichkeit, dass Messergebnis a_n ist $\rightarrow |\langle \alpha_n | \psi \rangle|^2$

Damit

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \psi | \hat{A} | \alpha_n \rangle}_{a_n \langle \psi | \alpha_n \rangle} \underbrace{\langle \alpha_n | \psi \rangle}_{\langle \alpha_n | \psi \rangle} = \sum_n a_n |\langle \alpha_n | \psi \rangle|^2$$

3.5 Formale Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_0\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(t) |\psi_0\rangle \quad \begin{array}{l} \text{Zustandsentwicklung} \\ \text{Operator} \end{array}$$

Norm: $\|\psi_t\|^2 = \langle \psi_t | \psi_t \rangle = \langle e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi_0 \rangle =$
 $= \langle \hat{U} \psi_0 | \hat{U} \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \|\psi_0\|^2$

Unitäre Operatoren im Hilbertraum:

def: $\langle \hat{U} \phi | \hat{U} \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

Eigenschaften:

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

beweis: $\langle \hat{U} \phi | \hat{U} \psi \rangle = \langle \hat{U}^\dagger \hat{U} \phi | \psi \rangle = \langle \hat{1} \phi | \psi \rangle$

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

def: $\|\hat{U}\| = 1 \quad (?)$

$$\|\hat{U} \phi\|^2 = \langle \hat{U} \phi | \hat{U} \phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle = \|\phi\|^2 \rightarrow \frac{\|\hat{U} \phi\|^2}{\|\phi\|^2} = 1$$

Norm eines Operators $\hat{A}$: $\|\hat{A}\| \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\|\hat{A} \phi\|^2}{\|\phi\|^2}$

$\hat{U} \leftrightarrow$ Drehung des Hilbertraums
 (Längen & Winkel-conserv.)

3.6 Heisenberg'sche Unschärferelation

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \quad \hat{B}^\dagger = \hat{B} \text{ hermitesche Operatoren}$$

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

Standardabweichung von Erwartungswert:

def: $\Delta A^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle$ und $\Delta B^2 = \langle \psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 | \psi \rangle$

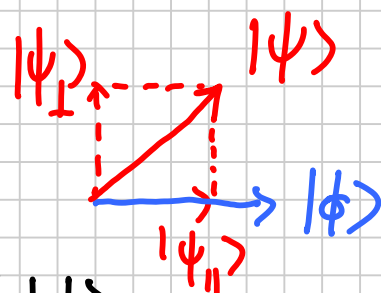
Schwarzsche Ungleichung:

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$$

Beweis: • $|\phi\rangle = |\sigma\rangle - 0 \cdot \mathbb{1}$!

• $|\phi\rangle \neq |\sigma\rangle \rightarrow |\psi\rangle = |\psi_{||}\rangle + |\psi_{\perp}\rangle$

mit $|\psi_{||}\rangle = \frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} |\phi\rangle$



dann: $\| \psi_{\perp} \|^2 \geq 0 \rightarrow \| \psi \|^2 \geq \| \psi_{||} \|^2 \rightarrow \langle \psi | \psi \rangle \geq \frac{|\langle \phi | \psi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle}$ q.e.d. $\square$

Dann: $\langle \hat{A} \psi | \hat{A} \psi \rangle \langle \hat{B} \psi | \hat{B} \psi \rangle \geq |\langle \hat{A} \psi | \hat{B} \psi \rangle|^2$

$\left. \begin{array}{l} \hat{A}^\dagger = \hat{A} \\ \hat{B}^\dagger = \hat{B} \end{array} \right\} \rightarrow \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle|^2$

$(\hat{A}\hat{B})^\dagger \neq \hat{A}\hat{B} \rightarrow \hat{A} \cdot \hat{B} = \frac{1}{2} \underbrace{\{\hat{A}, \hat{B}\}}_{\text{hermitesch}} + \frac{1}{2} \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\text{antihermitesch}}$

Antikommutator: $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

Kommutator: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Wobei: $\{\hat{A}, \hat{B}\}^\dagger = \{\hat{A}, \hat{B}\} \quad [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}, \hat{B}]$

$\langle \hat{A} \cdot \hat{B} \rangle$
 Der M: Wert eines hermiteschen Operators ist **reell**,
 der eines antihermiteschen Operators $\rightarrow$ **rein imaginär**

Dann! $(*) \quad |\langle \psi | \hat{A} \cdot \hat{B} | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle \psi | \{\hat{A}, \hat{B}\} | \psi \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2$

M: Wert $\langle \hat{A} \rangle$ und $\langle \hat{B} \rangle \stackrel{!}{=} 0$ - gewöhnliche Zahlen sind

$\Rightarrow [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle] = [\hat{A}, \hat{B}]$

von (*): $|\langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2$

Dann! $\Delta A \cdot \Delta B \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle} \sqrt{\langle \psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 | \psi \rangle} \stackrel{\text{Schwarz}}{\geq}$
 $\geq |\langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|$

Also! $\Delta A = \sqrt{\Delta A^2} \geq 0$

$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|$

Heisenberg 1527

Das bedeutet, dass Observablen, die nicht kommutierenden Operatoren entsprechen, nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden können.

Beispiel: $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

3.2 Bewegungsgleichung der Operatoren

a) Schrödinger-Darstellung $|\psi(t)\rangle$

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_0\rangle$$

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_t | \hat{A} | \psi_t \rangle$$

Zeitevolution der Dichtematrix

$$\hat{\rho}_t = |\psi_t\rangle \langle \psi_t| = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \hat{U}_t \hat{\rho}_0 \hat{U}_t^\dagger$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}] \rightarrow \langle \hat{A} \rangle_t = \text{Sp}(\hat{\rho}_t \hat{A})$$

b) Heisenberg-Darstellung

→ Operatoren sind zeitabhängig:

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \underbrace{|\psi_t\rangle}_{\hat{U}|\psi_0\rangle} | \hat{A} | \underbrace{|\psi_t\rangle}_{\hat{U}|\psi_0\rangle} \rangle = \langle \psi_0 | e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi_0 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi_0 | \hat{A}(t) | \psi_0 \rangle$$

mit

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

Heisenberg
Darstellung
der QM

Bewegungsgleichung: $\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)]$

$$\left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \right)$$

Ehrenfest-
Theorem

Erwartungswert $\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}(t)] \rangle$

Beispiel: ein Teilchen: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{r}] \rangle = \langle \hat{p} \rangle / m$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle$$

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle$$

$$-\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle = \langle \vec{F}(\hat{r}) \rangle \neq \vec{F}(\langle \hat{r} \rangle)$$

VONS - 1h

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm} \quad - \text{ON}$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1} \quad - \text{V}$$

✓ $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle m| \psi \rangle = \sum_n c_n \langle m|n\rangle \Rightarrow c_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$\langle m|\psi\rangle = \sum_n c_n \langle m|n\rangle = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle = \hat{1} |\psi\rangle$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1} \quad - \text{Vollständigkeit!}$$

Ortsraum: $\phi_n \leftarrow \langle \vec{r}'|n\rangle^*$

$$\sum_n \langle \vec{r}|n\rangle \langle n|\vec{r}'\rangle = \langle \vec{r}|\hat{1}|\vec{r}'\rangle =$$

$$= \langle \vec{r}|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

✓ $\sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

Satz 1: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{A}$ und $\hat{B}$ - gemeinsam $|\psi\rangle$

Beweis (für nicht-entartete Eigenfunktion)

von $\hat{A}$, $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

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

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

$$\Rightarrow |\psi\rangle = b|\psi\rangle \Rightarrow \hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$$

$\downarrow$
const

Satz 2: VONS $|\psi_n\rangle$: $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$
 $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$

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

Beweis:

$$[\hat{A}, \hat{B}]|\psi_n\rangle = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi_n\rangle =$$

$$= (a_n b_n - b_n a_n)|\psi_n\rangle = 0$$

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = 0 \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$|\vec{r}\rangle$

Raum

 $|\vec{p}\rangle$ (Faktor $2\pi\hbar$?)

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$$

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = 1$$

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$$

$$\int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = 1$$

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3r \underbrace{\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle}_{\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^*} \underbrace{\langle \vec{r} | \psi \rangle}_1 = \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \int d^3p \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle}_1 \underbrace{\langle \vec{p} | \psi \rangle}_1 = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

Alternativ

$$|\tilde{\vec{p}}\rangle = (2\pi\hbar)^{3/2} |\vec{p}\rangle$$

$$\langle \tilde{\vec{p}} | \tilde{\vec{p}}' \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta(\tilde{\vec{p}} - \tilde{\vec{p}}')$$

$$\int \frac{d^3\tilde{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\vec{p}}\rangle \langle \tilde{\vec{p}}| = 1$$

$$\begin{cases} \hat{\psi}(\vec{p}) = \int d^3r \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \\ \psi(\vec{r}) = \int \frac{d^3\tilde{p}}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\psi}(\tilde{\vec{p}}) e^{i\tilde{\vec{p}}\vec{r}/\hbar} \end{cases}$$

$$1 = \int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = \int d^3p |\psi(\vec{p})|^2 = \int \frac{d^3\tilde{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\hat{\psi}(\tilde{p})|^2$$