

<http://www.thp.uni-koeln.de/gross/teaching.html>

## Themen

- Stern-Gerlach als Einführung
- Mathematischer Formalismus (Lineare Algebra auf Hilberträumen)
- Dynamik: Schrödingergleichung im diskreten und kontinuierlichen Fall, eindimensionale Potentiale, Tunneleffekt.
- Der harmonische Oszillator
- Quantentheorie des Drehimpuls
- Das Wasserstoffatom
- Störtheorie
- Gemischte Zustände, Dekohärenz, Messtheorie
- Vielteilchentheorie, Verschräkung, Bell-Ungleichungen

## Literatur

- Ballentine: Quantum Mechanics
- Cohen-Tannoudji: Quantum Mechanics (viele Beispiele)
- David J. Griffiths: Introduction to Quantum Mechanics (leicht)
- Feynman, Leighton, Sands: [The Feynman Lectures on Physics](#) (lustig)
- Asher Peres: Quantum Theory, Concepts and Methods (konzeptionell)

Die Quantenmechanik wurde Anfang des 20. Jahrhunderts entwickelt, um Phänomene auf atomaren Skalen zu beschreiben. Weite Teil der Physik - z.B. das Verhalten von Festkörpern - ist nur mit Hilfe der QM verstehbar.

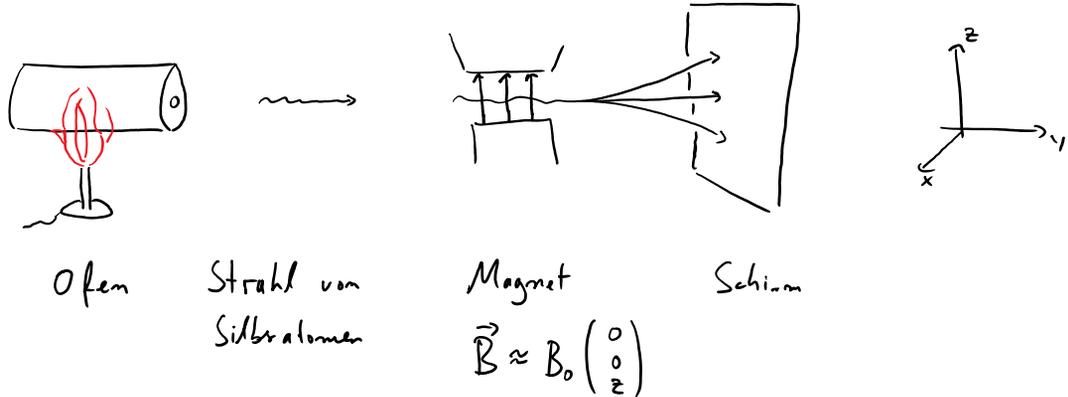
Die Vorhersagen der QM unterscheiden sich von den klassischen:

- *Quantitativ*: Zum Beispiel kann man die Leitfähigkeit von Festkörpern klassisch modellieren (Drudetheorie). So kann man z.B. das lineare Verhalten des Ohmschen Gesetzes wiederfinden - die quantitativen Vorhersagen für den Widerstand entsprechen aber nicht dem experimentellen Befund.
- *Qualitativ*: Interessanter ist, dass die QM Phänomene erklärt, die klassisch völlig unverständlich sind. Ein Beispiel ist die Stabilität von Atomen (warum fällt das Elektron nicht in den Kern?) und die Beobachtung diskreter Spektrallinien. Die "Diskretisierung" z.B. atomarer Energien in endliche Einheiten - den Quanten - gibt der Theorie ihren Namen.
- *Fundamental*: Darüber hinaus unterscheidet sich die Theorie in ihren fundamentalen Konzepten von dem klassischen Weltbild. Insbesondere redet sie nicht über den "wahren Wert" physikalischer Größen, sondern gibt nur probabilistische Vorhersagen über Messvorgänge. Lange war nicht klar, ob dies ein Defekt der Theorie ist, der durch eine vervollständigte Beschreibung der Natur behoben werden kann. Seit den 60er Jahren ist aber klar, dass jede Beschreibung der Natur notwendigerweise fundamentale neue Konzepte braucht. Wir werden dieses Thema gegen Ende der VL besprechen.

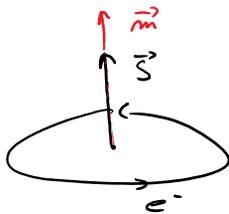
# Das Stern-Gerlach Experiment

Friday, March 29, 2019 12:16 PM

Das Stern-Gerlach-Exp. (Frankfurt 1922) misst das magnetische Moment von Atomen:



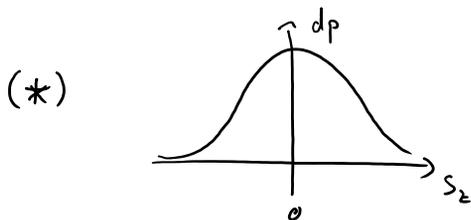
Einfaches Modell (nicht zu ernst nehmen): Bewegung der Elektronen erzeugt Kreisstrom  $\Rightarrow$  magnet. Moment  $\vec{m} =$  gyromagnetisches Verhältnis  $\gamma$   $\cdot$  Drehmoment  $\vec{S}$ .



$\Rightarrow$  Energie im B-Feld  $= -\vec{m} \cdot \vec{B} \Rightarrow$  Kraft  $= \vec{\nabla}(\vec{m} \cdot \vec{B}) = S_z \gamma B_0 \vec{e}_z$ .

$\rightarrow$  Ablenkung  $\sim$  z-Komponente des Drehmoments  $\vec{S}$ .  $\Rightarrow$  Sprechweise: Man misst "Spin".

Erwartetes Ergebnis für Verteilung von  $S_z$  (qualitativ):



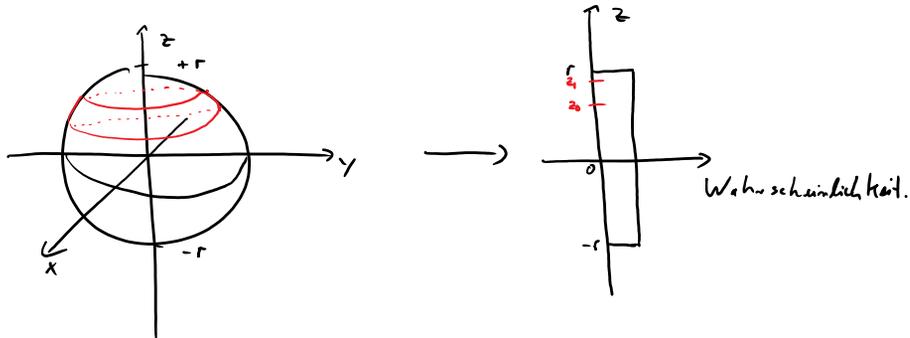
- Maximaler Wert wird bei  $S_z = 0$  angenommen,
- In Richtung der Ränder fällt die Verteilung monoton ab.

optional

optional

Argument: ① Die Verteilung der Atome im Ofen ist rotationsinvariant  
(Keine Richtung ist ausgezeichnet  $\Rightarrow$  alle gleichwahrscheinlich).

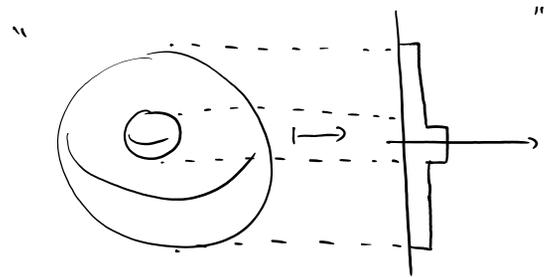
② Ziehe Punkt zufällig von 2-Sphäre mit Radius  $r$ .  
 $\Rightarrow$  die  $z$ -Komponente ist zwischen  $-r$  und  $r$  gleichverteilt.



Bew.:  $P_r[z \in [z_0, z_1]] = \frac{1}{4\pi r^2} \int_{\sigma=\cos^{-1}z_0}^{\cos^{-1}z_1} d\sigma \int_{\phi=0}^{2\pi} r \sin\sigma d\phi = \frac{1}{2r} (z_1 - z_0) \quad \square$

③  $\Rightarrow dp(z) = \int_{s=|z|}^{\infty} \frac{1}{2s} dp_{||s||}(s)$

↑ Wahrscheinlichkeitsdichte der  $z$ -Komponente      ↑ Wahr.-dichte des Drehimpulsbetrags.

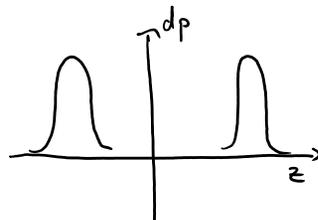
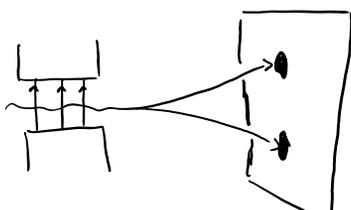


$\Rightarrow$  von 0 monoton fallend.

Das Argument zeigt, dass man die detaillierte statistische Mechanik im Ofen nicht verstehen muss. Aus einfachen geometrischen Überlegungen alleine folgt, dass Rotationsinvarianz ein Maximum bei Null impliziert.

Beobachtet wird:

①



Zwei Maxima, mit

(\*) offenbar un-  
verträglich.



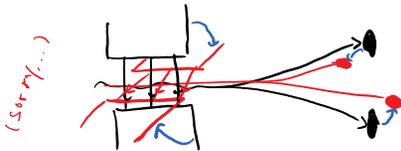


verträglich.



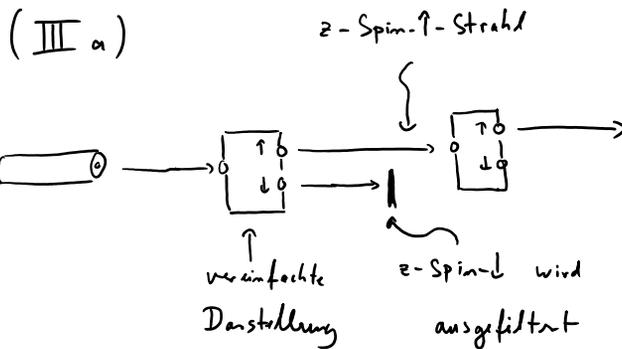
Interessant. Machen wir weitere Experimente:

II) Vielleicht war Annahme der Rotationsinvarianz falsch? Dann müsste sich das Bild verändern, wenn wir das B-Feld drehen. Ausprobieren:

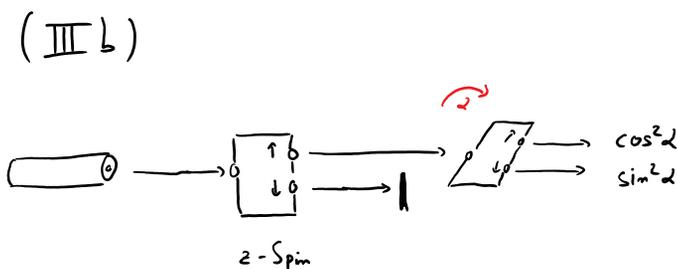


... wieder nichts. Die Punkte drehen sich mit, die Verteilung ändert sich nicht.

III) Exp. I zeigt, dass die z-Komponente des Spins zwei Zustände annehmen kann. Nennen wir sie "spin up, ↑" und "spin down, ↓". Experimentieren wir mal nur mit der ↑-Sorte:



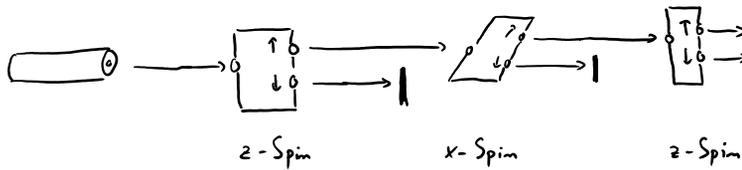
Wiederholt man die Spin-Messung im z-Richtung am gefilterten Strahl, nehmen alle Atome den ↑-Ausgang. Die Eigenschaft "z-Spin ↑" ist also "stabil".



Verdreht man die 2. Messung um den Winkel  $\alpha$  gegen die z-Richtung nimmt ein Anteil von  $\cos^2 \alpha$  Atomen weiterhin den ↑-Ausgang. Ein Anteil von  $(1 - \cos^2 \alpha) = \sin^2 \alpha$  aber den ↓-Port. (Das Verhalten erinnert etwas an ...)

polarisiertes Licht (wenn man  $\alpha$  durch  $\frac{\alpha}{2}$  ersetzt)...

(III c)



Kann man Atome finden, die  
z-Spin up und  
x-Spin up  
haben?

Vielleicht so: Filter 2x, erst in z, dann in x-Richtung...

... das kloppt nicht! Eine anschließende z-Messung liefert z-Spin  $\uparrow$  und z-Spin  $\downarrow$  zu gleichen Anteilen. ↑

- Auch hier hätten "Polarisationsfilter mit halben relativen Winkeln" die richtige Intuition gegeben.
- Wir werden später sehen, dass hier eine "Unschärferelation" am Werk ist.

Also eine... unübersichtliche Situation, die mit dem klassischen Verhalten von Drehimpulsen nicht verträglich ist. Wir brauchen einen neuen Rahmen.

Die neue Theorie wird fürs erste *probabilistisch* sein müssen: Für ein einzelnes Atom im ersten Experiment haben wir zur Zeit keinen Anhaltspunkt um vorherzusagen, ob es nach oben oder nach unten abgelenkt werden wird. Da wir aber wissen, dass die Atome sich hälftig auf die beiden Pfade verteilen, macht es Sinn dem Ereignis "Atom geht nach oben/unten" jeweils eine Wahrscheinlichkeit von 50% zuzuordnen.

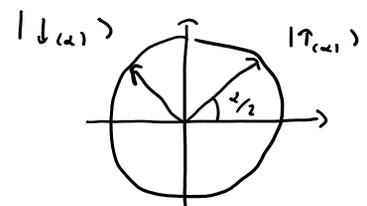
Die Quantenmechanik ordnet den Komponenten der beschriebenen Experimente mathematische Objekte zu, und sagt, wie diese kombiniert werden müssen, um Wahrscheinlichkeiten zu berechnen.

Für das Stern-Gerlach-Experiment ist die Konstruktion einfach (wenn auch etwas mysteriös...). Wir behandeln sie hier als Vorschau auf die systematische Theorie.

## Quantenmechanische Beschreibung

Definieren zwei Vektoren:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} = |\uparrow(\alpha)\rangle, \quad \begin{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \\ -\cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} = |\downarrow(\alpha)\rangle$$

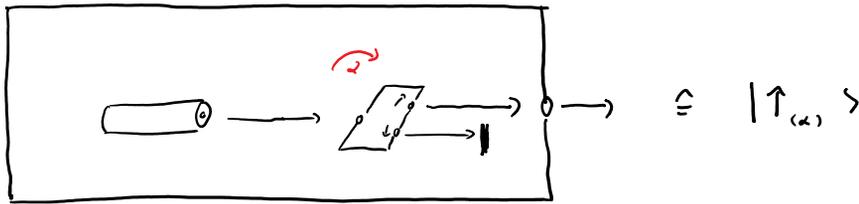


Die lustigen Klammern "1.5" heißen Kets. Für's Erste ist das nur Notation.

Die Vektoren definieren eine ONB für  $\mathbb{C}^2$ .

Die Verbindung zwischen Vektoren und Physik geht so:

## I Präparation



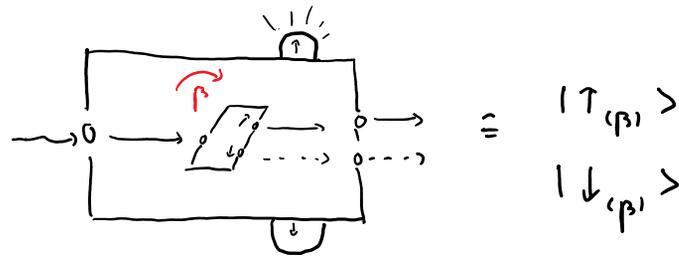
Wir drehen die Magneten um den Winkel  $\alpha$  - also so, dass das  $\vec{B}$ -Feld parallel zu  $\begin{pmatrix} \sin \alpha \\ 0 \\ \cos \alpha \end{pmatrix}$  ausgerichtet ist - und selektieren Atome, die entlang dieses Vektors abgelenkt werden (anstatt in die Gegenrichtung).

Definition: Dies ist eine Präparationsvorschrift. Atome, die auf diese Art behandelt werden, sind im Zustand  $|\uparrow_{(\alpha)}\rangle$ .

Der Vektor  $|\uparrow_{(\alpha)}\rangle$  heißt

- Zustandsvektor, oder
- Wellenfunktion, oder
- (reiner) Zustand.

## II Messungen



Um den Zustand der Atome zu messen, betrachten wir folgenden Aufbau: Ein eingehendes Atom wird durch ein um  $\beta$  rotiertes B-Feld geschickt. Es wird dann entlang ( $\uparrow$ ), oder entgegen ( $\downarrow$ ) des Felds abgelenkt. Ein Sensor registriert den Pfad, und steuert eine Anzeige, die  $\uparrow$  oder  $\downarrow$  ausgibt. Das Atom verlässt dann die Vorrichtung.

Wir assoziieren die Vektoren  $|\uparrow_{(\beta)}\rangle / |\downarrow_{(\beta)}\rangle$  mit den beiden Ausgängen.

Die QM postuliert folgende Regeln:

(1) Misst man den Spin eines Atoms im Zustand  $|\uparrow_{(\alpha)}\rangle$  entlang der  $\beta$ -Richtung, erhält man

• das Ergebnis  $\uparrow$  mit Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned}
 |\langle \uparrow_{\beta} | \uparrow_{\alpha} \rangle|^2 &:= \left( \begin{pmatrix} \cos \beta/2 \\ \sin \beta/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ \sin \alpha/2 \end{pmatrix} \right) \\
 &= \left| \cos \beta/2 \cos \alpha/2 + \sin \beta/2 \sin \alpha/2 \right|^2 \\
 &= \cos^2((\beta - \alpha)/2).
 \end{aligned}$$

• das Ergebnis  $\downarrow$  mit W.

$$|\langle \downarrow_p | T_\alpha \rangle|^2 = \dots$$

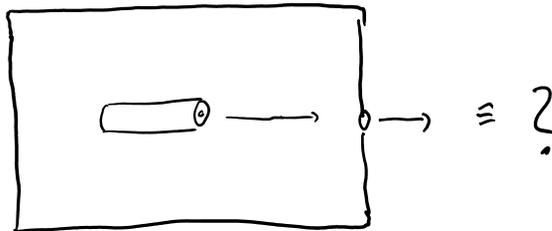
$$= \sin^2 \left( (\beta - \alpha) / 2 \right).$$

(2) Direkt nach der Messung ist das Atom im 2st.

$|\uparrow_p\rangle$  oder  $|\downarrow_p\rangle$  - ja nach Messausgang.

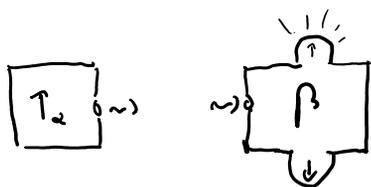
Mit den Regeln können wir die Experimente III a - III c korrekt beschreiben!

Experiment I und II aber noch nicht, da wir die Präparation



noch nicht formalisiert haben. (Der 2st. wird nicht durch eine Wellenfkt. sondern durch eine Dichtematrix beschrieben.  $\rightarrow$  später).

### Eine Unschärfenrelation



Wir betrachten eine Quelle von Spin- $T_{\alpha 1}$ -Teilchen und eine Messung des Spins entlang der  $\beta$ -Achse.

Wenn  $\alpha = \beta$  bzw.  $\alpha = \beta + \pi$  ist das Ergebnis deterministisch

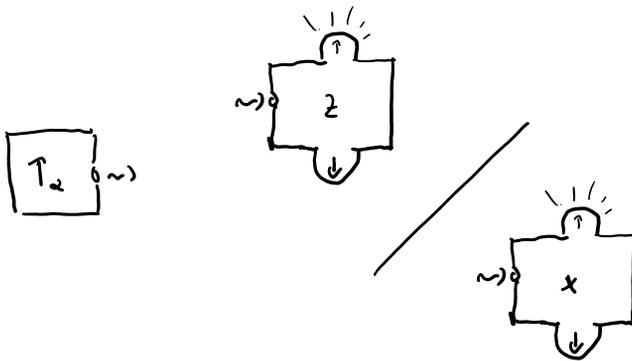
(meistlich  $\uparrow$  bzw.  $\downarrow$  mit  $p=1$ ).

Für alle anderen relativen Winkel ist es unschärf - auf maximale Art, wenn  $\alpha = \beta \pm \pi/2 \Rightarrow p(\uparrow) = p(\downarrow) = 1/2$ .

Im Folgenden quantifizieren wir die Schärfe der Verteilung durch

$$S = \max(p(\uparrow), p(\downarrow)) \in [1/2, 1]$$

(ein etwas unkonventionelles Maß - aber legitim und leicht zu analysieren).



Frage: Kann man  $\alpha$  so wählen, dass sowohl Spin- $z$  wie auch Spin- $x$ -Messungen eine maximale Schärfe von 1 haben?

Antwort: Nein! Es gilt die Unschärfrelation

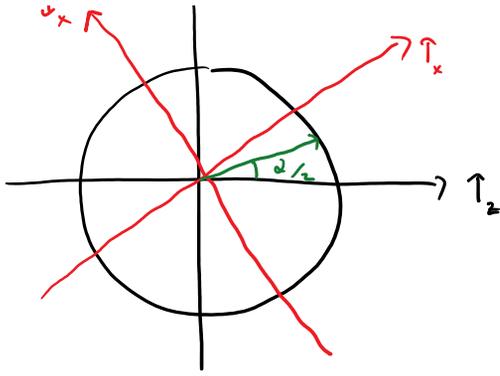
$$S(z\text{-Messung}) + S(x\text{-Messung}) \leq 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 1,71.$$

Bew.:  
(Sketch)



$\forall \alpha$ :

$S(z)$  ist Quadrat der Projektion des grünen Einheitsvektors auf die nächste schwarze Achse.



nächste schwarze Achse.

$S'(x)$  ist .... auf die nächste rote Achse.

Da die beiden Koordinatensysteme gegeneinander verdreht sind, gibt es kein  $\alpha$  s.d.  $S'(x) = S'(z) = 1$ . Die quantitative Abschätzung ist Hausaufgabe.  $\square$

### Diskussion:

Wir haben ein erstes, leichtes Problem quantenmechanisch behandelt.

Technisch war das sehr einfach. Aber es stellt sich die offensichtliche Frage:

"Wie, um alles in der Welt, kommt man darauf?"

Also, woher kommen diese Vektoren, die inneren Produkte, die halben Winkel und der allgemeine Formalismus?

Die ehrlichste Antwort ist: *Trial and error* zu Beginn des 20. Jahrhunderts. Die QM wurde im Wesentlichen erraten und dann experimentell bestätigt. Es gab auch alternative Hypothesen (eine, die "alte QM", haben einige von Ihnen am Ende der TP1-Vorlesung bei mir kennengelernt), die sich als nicht richtig oder allgemein genug herausgestellt haben.

Es gibt ein recht aktives Forschungsprogramm mit dem Ziel, die Struktur der QM eindeutig aus "plausiblen" physikalischen Annahmen abzuleiten - so wie z.B. die Struktur der speziellen Relativitätstheorie aus der Beobachtung folgt, dass die Lichtgeschwindigkeit in jedem Bezugssystem konstant ist. Der Erfolg ist gemischt. Auch wenn sich kein allgemeiner akzeptierter Ausgangspunkt ergeben hat, hat das Programm durchaus Erfolge aufzuweisen. Dies könnte ein Vortragsthema für ein Studentenseminar zur QM nach diesem Semester sein... (Die "halben" Winkel werden wir aber bald erklären können - sie kommen aus der Darstellungstheorie der Drehgruppe...)

Besonders zentral ist die Frage, woher die Wahrscheinlichkeiten kommen. Sind sie ein Zeichen einer unvollständigen Beschreibung, die uns zwingt, den Zustand nicht genau bekannter Freiheitsgrade probabilistisch zu modellieren (wie in der klassischen Mechanik)? Oder sind sie, was spannender wäre, in einem geeigneten Sinn fundamental? Dazu später mehr...

Zuvor haben wir Zustände und Messergebnisse mit Vektoren, und Wahrscheinlichkeiten mit inneren Produkten assoziiert.

Hier führen wir den allgemeinen mathematischen Rahmen ein: Lineare Algebra komplexer Vektorräume mit innerem Produkt.

## (I) Hilberträume

In der VL brauchen wir zwei Arten solcher VR:

①  $\mathbb{C}^d$  der VR d-dimensionaler komplexer Spaltenvektoren.

Bsp.:  $\mathbb{C}^2$  für das S-G-Experiment.

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_d \end{pmatrix}$$

Das innere Produkt zwischen Vektoren  $v, w \in \mathbb{C}^d$  ist

$$(*) \quad \langle v | w \rangle = \sum_{i=1}^d \bar{v}_i w_i.$$

Eigenschaften:

①  $\langle w | v \rangle = \overline{\langle v | w \rangle}$

② Es ist linear im zweiten Eingang:  $\langle v | \lambda w \rangle = \lambda \langle v | w \rangle$ ,  
und anti-linear im ersten Eingang:  $\langle \lambda v | w \rangle = \bar{\lambda} \langle v | w \rangle$ .

③  $\langle v | v \rangle = \|v\|^2 \geq 0$   
Gleichheit  $\Leftrightarrow v=0$ .

(  Die Konvention in der Mathematik ist umgekehrt. )

Das nennt man ein sesqui-lineares inneres Produkt.

$\mathcal{L} "1/2"$

② Komplexwertige Funktionen  $\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}$ .

Anwendung: Teilchen mit  $n$  Freiheitsgraden.  $\leadsto$  später.

Addition und Skalarmultiplikation ist punktweise:

$$f, g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}.$$

$$(f+g)(\vec{x}) := f(\vec{x}) + g(\vec{x}),$$

$$(\lambda f)(\vec{x}) = \lambda f(\vec{x}).$$

Das innere Produkt ist das "kontinuierliche Analogon" von (\*):

$$\langle f | g \rangle := \int_{\mathbb{R}^m} d^m \vec{x} \bar{f}(\vec{x}) g(\vec{x})$$

Die Menge der Fkt. auf dem  $\mathbb{R}^m$  hat keine endliche Basis

- ist also  $\infty$ -dimensional.

Bei der präzisen Behandlung von Fkt.-VR treten einige technische Schwierigkeiten auf (wie werden diese in der VL meistens ignoriert):

a) Innere Produkte können  $\infty$  sein.

Bsp.:  $f(\vec{x}) = 1 \leadsto \langle f | f \rangle = \int_{\mathbb{R}^m} d^m \vec{x} = \infty.$   $\ddots$

b) Funktionen können nicht integrierbar sein.

Bsp.:  $m=1.$

$$f(x) = \begin{cases} \sin(1/x) & x \neq 0 \\ 0 & x = 0 \end{cases} \quad \ddots$$

c) Nicht-triviale Fkt. können Norm 0 haben:

Bsp:  $n=1$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & x \in \mathbb{Z} \\ 0 & x \notin \mathbb{Z} \end{cases}$$



$$\leadsto \langle f|f \rangle = 0.$$

Lösung: Wir schränken uns auf "gutartige" Fkt. ein:



$$L^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid \int |f|^2 dx \text{ existiert und ist endlich} \right\}$$
$$\setminus \left\{ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid \int |f|^2 dx = 0 \right\}.$$

Technisch ist das ein Quotientenvektorraum: Die quadratintegrierbaren Funktionen "modulo" die Funktionen, deren Quadratintegral verschwindet. Letzteres sind genau die Funktionen, die nur auf einer Nullmenge von Null verschieden sind. Die Elemente des Quotientenvektorraums  $L^2(\mathbb{R}^n)$  sind also Äquivalenzklassen quadratintegrierbarer Funktionen, wobei je zwei Funktionen äquivalent sind, wenn sie sich nur auf einer Nullmenge unterscheiden.

Verwirrt?

Macht nichts. Ich erwähne das nur der Vollständigkeit halber. Praktisch werden wir einfach mit komplexwertigen Funktionen auf reellen Vektorräumen arbeiten. Solange alles gut geht, werden wir diese technischen mathematischen Details ignorieren. In der Praxis führt das ~~nicht~~ selten zu Problemen...

Das innere Produkt definiert eine Norm:

$$\| \psi \| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

In beiden Bsp. gilt (warum?)

$$\| \psi \| = 0 \Leftrightarrow \psi = 0. \quad (*)$$

Einen komplexen VR mit sesquilinearem innerem Produkt nennt man Hilbertraum.

Wir werden sehen: In der QM beginnt man die Modellierung eines Systems damit, dass man ihm einen Hilbertraum zuordnet. Hilberträume spielen in der QM die gleiche Rolle, wie der Konfigurationsraum (das Objekt dessen Punkte mit verallgemeinerten Koordinaten beschrieben werden) in der Lagrange-Mechanik, oder der Phasenraum in der Hamiltonmechanik: Sie stellen ein mathematisches Modell für alle möglichen Zustände des Systems dar. (Man nennt das die *Kinematik* eines Systems - ein elementarerer Konzept als die *Dynamik*, die beschreibt, welche Abfolge von Zuständen unter der Zeitentwicklung des Systems angenommen werden).

Da die Modellierung mit der Wahl des Hilbertraums *beginnt*, gibt es keine mathematisch präzise Regel, welchen HR man einem System zuordnet. Wir werden aber genug Beispiele kennenlernen, so dass es in der Praxis i.d.R. eine "offensichtliche" Wahl gibt.

Mehr zu all dem: später.

## II Dirac-Notation

Sei  $\mathcal{H}$  ein HR.

Physiker/innen verziern Vektoren  $x \in \mathbb{R}^n$  manchmal mit Pfeilen:  $\vec{x}$ . In der QM verziert man Vektoren  $\psi \in \mathcal{H}$  häufig als "Kets":  $|\psi\rangle$ .

Jeder Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$  definiert eine lineare Fkt.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\rightarrow \mathbb{C}, \\ \phi &\mapsto \langle \psi | \phi \rangle. \end{aligned}$$

In der QM schreibt man  $\langle \psi |$  für diese Fkt. - ein "Bra". Das ist sehr suggestiv:

$$(*) \quad \begin{array}{ccc} \langle \psi | (|\phi\rangle) & = & \langle \psi | \phi \rangle \\ \uparrow \quad \quad \quad \uparrow & & \uparrow \\ \text{Bra} \quad \text{von} \quad \text{Ket} & & \text{braket} \quad (\text{Hoh...}) \end{array}$$

Mathematisch ist ein Bra ein *Dualvektor* oder ein *lineares Funktional* (nicht zu verwechseln mit den "Funktionen von Funktionen", die wir in der Mechanik als Funktionale bezeichnet haben!).

Vielleicht haben Sie mal von dem Satz von Riesz gehört, der sagt, dass *alle* linearen Funktionale auf einem Hilbertraum durch innere Produkte mit Vektoren (also durch Bras) dargestellt werden können.

Die Formel (\*) ist das innere Produkt von  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ .

Ebenso wichtig ist das äußere Produkt, das aus  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  eine lineare Abb. (auch: Operator)  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  macht.

Das geht so:  $|\phi\rangle\langle\pm|$  ist definiert als die Abb.:

$$(*) \quad \mathcal{H} \ni |\beta\rangle \mapsto |\phi\rangle\langle\pm|(|\beta\rangle) := \underbrace{|\phi\rangle}_{\in \mathcal{H}} \left( \underbrace{\langle\pm|\beta\rangle}_{\in \mathbb{C}} \right) \in \mathcal{H}.$$

Den Ausdruck  $|\phi\rangle\langle\pm|\beta\rangle$  kann man auf zwei Arten lesen:

$$\begin{array}{ccc} & |\phi\rangle\langle\pm|\beta\rangle & \\ & \swarrow \quad \searrow & \\ (|\phi\rangle\langle\pm|)(|\beta\rangle) & & |\phi\rangle(\langle\pm|\beta\rangle) \\ \text{"Operator von Vektor"} & & \text{"Vektor mal innerem Produkt"} \end{array}$$

Per Def. (\*) sind beide Lesarten gleich. Das Verknüpfen von Bras und Kets ist also assoziativ!

### III Basen

Eine Menge  $\{|e_i\rangle\}_i \subset \mathcal{H}$  mit

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

heißt orthonormal.

Wenn jeder Vektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  als Linearkombination

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |e_i\rangle \quad (*)$$

der  $|e_i\rangle$  geschrieben werden kann, hat man eine Orthonormal-Basis (ONB).

Beh.: Für eine ONB  $\{|e_i\rangle\}_i \subset \mathcal{H}$  gilt die (wichtige!) — Vollständigkeitsrelation

$$\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \mathbb{1}$$

↑ Identität auf  $\mathcal{H}$ .

Bew.: Sei  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Basis-Annahme  $\Rightarrow \exists$  Koeffizienten  $\psi_j \in \mathbb{C}$ , s.d.

$$|\psi\rangle = \sum_j \psi_j |e_j\rangle.$$

Rechne:

$$\begin{aligned} \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\right) |\psi\rangle &= \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\right) \left(\sum_j \psi_j |e_j\rangle\right) \\ &= \sum_{ij} \psi_j |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i|e_j\rangle}_{=\delta_{ij}} = |\psi\rangle \end{aligned}$$

□

Der Nutzen der Vollständigkeitsrelation ergibt sich daraus, dass die linke Seite von der Basis abhängt, die rechte Seite aber basisunabhängig ist. Daher kann man "durch Einschleiben der Identität & Einsetzen der Vollständigkeitsrelation" oft zwischen einer koordinatenunabhängigen Darstellung, und dem Ausdruck in Koordinaten wechseln. Was das bedeutet, wird am besten anhand von Beispielen klar.

① Die Entwicklungskoeffizienten sind durch innere Prod. mit der Basis gegeben:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{(\langle e_i|\psi\rangle)}_{=\psi_i} |e_i\rangle.$$

② Analoge Formel für Bras:

$$\langle\psi| = \langle\psi|\mathbb{1} = \langle\psi|\left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\right) = \sum_i \underbrace{(\langle\psi|e_i\rangle)}_{=\langle e_i|\psi\rangle = \bar{\psi}_i} \langle e_i|.$$

③ Formel für innere Produkte in beliebiger ONB:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \phi \rangle &= \langle \psi | \mathbb{1} | \phi \rangle = \sum_i \langle \psi | e_i \rangle \langle e_i | \phi \rangle \\ &= \sum_i \bar{\psi}_i \phi_i.\end{aligned}$$

④ (Spezialfall von ③, manchmal "Parseval-Relation"):

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \dots = \sum_i |\psi_i|^2.$$

⑤ Beschreibung von Operatoren durch Matrix-Elemente:

$$A = \mathbb{1} A \mathbb{1} = \sum_{i,j} |e_i\rangle \langle e_i| A |e_j\rangle \langle e_j| = \sum_{i,j} A_{ij} |e_i\rangle \langle e_j|, \quad A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle.$$

↑  
"Matrix-Elemente von  
A bzgl.  $\{|e_i\rangle\}$ -Basis"

Wenn  $\mathcal{X}$  endlich-dimensional ist, bestimmt jede ONB  $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^d$  eine Abb.  $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{C}^d$ , also eine Darst. der Elemente des HRs durch Spaltenvektoren. Dies ist wichtig fürs konkrete Rechnen und für Computer-Implementierungen.

Konkret:

Kets  $\rightarrow$  Spaltenvektoren  $|\psi\rangle \mapsto \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_d \end{pmatrix}, \quad \psi_i = \langle e_i | \psi \rangle.$

Bras  $\rightarrow$  Zeilenvektoren  $\langle \psi | \mapsto (\bar{\psi}_1, \dots, \bar{\psi}_d)$

Operatoren  $\rightarrow$  Matrizen  $A \mapsto \begin{pmatrix} A_{1,1} & \dots & A_{1,d} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{d,1} & \dots & A_{d,d} \end{pmatrix} \quad A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$

Mit Hilfe der Vollst.-Relation sieht man (vergl. ①-⑤), dass

die Verknüpfungen von Bra's, Ket's und Operatoren den üblichen Rechenregeln für Vektoren und Matrizen entspricht...

## Die Spur

Erinnerung: Die Summe  $\sum_i A_{ii}$  der Diagonalelemente einer Matrix ist ihre Spur (engl.: trace). Die Spur ist die Summe der Eigenwerte und daher unabhängig von der Basis!

D.h. wenn  $A: \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$  ein Operator ist, dann ist

$$\text{tr } A = \sum_i \langle e_i | A | e_i \rangle$$

unabh. von der Wahl der Basis.

Eigenschaften:

① Zyklische Invarianz

$$\text{tr } AB = \text{tr } BA$$

② Äußere Produkte:

$$\text{tr}(|\pm\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\pm\rangle$$

## Konvention:

Wenn "klar ist" auf welche Basis man sich bezieht (und manchmal auch sonst),

schreibt man oft nur den Index in die Klammern:

$$|e_i\rangle \rightsquigarrow |i\rangle$$

$$\langle e_j| \rightsquigarrow \langle j|.$$

Da müssen Sie sich dran gewöhnen...

Eine erste Formulierung der Axiome der QM:  
(Reine Zustände, Basis-Messungen)

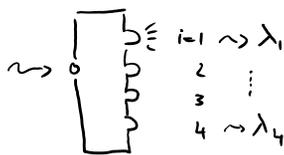
- ① Jedem Quantensystem kann ein HR  $\mathcal{H}$  zugeordnet werden.
- ② Jeder Präparationsvorschrift kann ein normierter Vektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  zugeordnet werden.  
 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$
- ③ Jeder Messung kann eine ONB  $\{|e_i\rangle\}_i$  zugeordnet werden; dabei entspricht jedes mögliche Messergebnis  $i$  einem Element  $|e_i\rangle$  der Basis.
- ④ Es gilt

$$Pr[\text{i-te Ergebnis} \mid \text{Präparation } |\psi\rangle] = |\langle e_i | \psi \rangle|^2 \quad (*)$$

Die vereinfachte Version der Axiome der QM wird uns fürs erste reichen. Später werden wir aber allgemeinere Arten von Präparationen und Messungen kennenlernen.

Die Axiome sagen nichts darüber aus, welchen HR man einem konkreten System zuordnen soll, oder welchen Vektor einer Präparation, oder welche Basis einer Messung. Es gibt eine Reihe von "Quantisierungsregeln": das sind Heuristiken (also eine Art "Erfahrungsregeln"), die dazu Aussagen machen. Wir werden viele Beispiele sehen. "Quantisierung" ist aber ein inexacte Wissenschaft. "Raten und experimentell überprüfen" ist eine legitime und im Allgemeinen notwendige Strategie.

In der Praxis werden Messungen statt durch ONBs i.A.R. indirekt durch Operatoren beschrieben - den Observablen:



- Wir ordnen jedem Messengang  $i$  eine reelle Zahl  $\lambda_i \in \mathbb{R}$  zu.
- Def. den Erwartungswert als

$$\sum_i \lambda_i Pr[i] \in \mathbb{R}.$$

Dann:

$$\begin{aligned} \boxed{\sum_i \lambda_i Pr[i]} &= \sum_i \lambda_i |\langle e_i | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_i \lambda_i \langle \psi | e_i \rangle \langle e_i | \psi \rangle \end{aligned}$$

$$= \langle \psi | \underbrace{\left( \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i| \right)}_{=: A} | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned} &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\ &= \text{tr} A | \psi \rangle \langle \psi | \\ &=: \langle A \rangle_{\psi} \end{aligned}$$

Beide Darst. werden oft verwendet.

Der Operator  $A = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i|$  ist die Observable, die eine Messung in der  $|e_i\rangle$ -Basis mit reellwertigen Ergebnissen  $\lambda_i$  entspricht.

Sie werden sicher schon gehört haben, dass in der Quantenmechanik physikalische Größen durch Operatoren beschrieben werden. Das Konzept der Observable macht dies präzise.

Im Zusammenhang von Messungen ist dieser Operator nur eine praktische Art, Messbasis und die reellen Ergebnisse zusammenzufassen. Im nächsten Kapitel werden wir sehen, dass Observablen noch eine zweite, fundamentalere Rolle in der Quantenmechanik haben: Mittels der Schrödingergleichung erzeugen sie die Zeitentwicklung von Quantensystemen...

Bsp.: Spin-Messungen.

- Basis:  $|\uparrow_p\rangle = \cos \frac{\beta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\beta}{2} |\downarrow\rangle$ ,  $|\downarrow_p\rangle = \sin \frac{\beta}{2} |\uparrow\rangle - \cos \frac{\beta}{2} |\downarrow\rangle$ .
- Assoziiere "spin up"  $\leadsto +1$ , "spin down"  $\leadsto -1$ .
- Observable:

$$\begin{aligned} &+ |\uparrow_p\rangle \langle \uparrow_p| - |\downarrow_p\rangle \langle \downarrow_p| \\ &= (\cos^2 \frac{\beta}{2} - \sin^2 \frac{\beta}{2}) |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + (\sin^2 \frac{\beta}{2} - \cos^2 \frac{\beta}{2}) |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \\ &\quad + 2 \cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) \\ &= \cos \beta (|\uparrow\rangle \langle \uparrow| - |\downarrow\rangle \langle \downarrow|) + \sin \beta (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) \end{aligned}$$

- Bzgl. der  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ -Basis entspricht

• Bzgl. der  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ -Basis entspricht

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \quad \text{die Matrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} =: \sigma_z.$$

$$|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \quad \text{die Matrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} =: \sigma_x.$$

Die sind die x- und z- Pauli-Matrizen.

• Es gibt eine weitere Pauli-Matrix

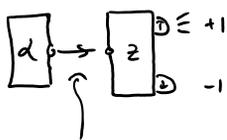
$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

Das ist die Obs., die Spin-y-Messungen entspricht  
(mit S-G-App. nicht direkt durchführbar).

Die Paulimatrizen werden Sie für den Rest Ihres Lebens begleiten. Ihre algebraischen und geometrischen Eigenschaften werden uns noch viel beschäftigen.

Anmerkung: Bei der Betrachtung von Spin-1/2-Systemen werden wir nicht zwischen Operatoren und ihrer Matrixdarstellung in der  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ -Basis unterscheiden. Insbesondere werden wir die Symbole  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  sowohl für die Observablen, wie auch für die konkreten  $2 \times 2$ -Matrizen verwenden. In unserem Fall macht das Sinn, da wir die "up" und "down" Kets zu Beginn mit den entsprechenden Spaltenvektoren gleichgesetzt haben. Allgemeiner gibt es in der Physik die Konvention, dass man mit jedem Hilbertraum immer auch eine Basis wählt, und zwischen abstrakten Vektoren / Operatoren und ihrer Darstellung bzgl. dieser Basis notationell nicht unterscheidet. Das führt nur selten zur Verwirrung. :) Die Basis ist i.d.R. eine Eigenbasis des Hamiltonoperators, den wir im nächsten Abschnitt kennenlernen werden.

• Anwendung:



$$|\uparrow_\alpha\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |\downarrow\rangle$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

$$\langle \sigma_z \rangle_{|\uparrow_\alpha\rangle} = \langle \uparrow_\alpha | \sigma_z | \uparrow_\alpha \rangle$$

$$= (\cos \frac{\alpha}{2}, \sin \frac{\alpha}{2}) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2}$$

$$= \cos \alpha.$$

$$\Rightarrow \text{Bsp.: } \alpha = 90^\circ \Rightarrow \langle \sigma_z \rangle = \text{Pr}[|\uparrow\rangle] - \text{Pr}[|\downarrow\rangle] = 0$$

$$\Rightarrow \text{Pr}[|\uparrow\rangle] = \text{Pr}[|\downarrow\rangle] = \frac{1}{2}$$

Die Konstruktion  $\{(|f_i\rangle, \lambda_i)\}_i \rightarrow A = \sum_i \lambda_i |f_i\rangle\langle f_i|$  kann man umkehren. D.h. man kann aus  $A$  die  $\lambda_i$  und die ONB  $\{|f_i\rangle\}_i$ :

Die Konstruktion  $\{|f_i\rangle, \lambda_i\}_i \rightarrow A = \sum_i \lambda_i |f_i\rangle\langle f_i|$  kann man umkehren. D.h. man kann aus  $A$  die  $\lambda_i$  und die ONB  $\{|f_i\rangle\}_i$  (bis auf eine Phase) rekonstruieren. Denn:

$$A |f_i\rangle = \left( \sum_j \lambda_j |f_j\rangle\langle f_j| \right) |f_i\rangle = \lambda_i |f_i\rangle,$$

Die  $\lambda_i$  sind also die Eigenwerte, und  $\{|f_i\rangle\}$  die Eigenbasis von  $A$ .

Solange jedem Messausgang eine eindeutige reelle Zahl  $\lambda_i$  zugeordnet ist, ist die Charakterisierung einer Messung durch eine Observable also äquivalent zur Charakterisierung durch eine ONB.

Ein Operator ist also genau dann eine Observable, wenn er eine orthogonale Eigenbasis und reelle Eigenwerte besitzt. Es gibt eine einfache Art, solche Operatoren zu erkennen:

## Hermiteische Operatoren

Ein wenig mehr lineare Algebra...

Sei  $A: \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$  ein Operator.

Es gibt genau einen Operator  $A^+$  s.d.  $\forall \psi, \phi \in \mathcal{K}$

$$\langle \psi | A \phi \rangle = \langle A^+ \psi | \phi \rangle. \quad (*)$$

Wir sagen:  $A^+$  ist der zu  $A$  adjungierte Operator.

Das Konzept ist einfacher bzgl. einer ONB  $\{|i\rangle\}_i$ :

Für

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

setze

$$A^+ := \sum_{i,j} \overline{A_{ji}} |i\rangle\langle j|.$$

Man überprüft denn leicht, dass (\*) gilt.

Die Matrix von  $A^+$  ist also die transp. und komplex konj. von  $A$ .

Beh.:  $\forall z \in \mathbb{C}, \alpha, \beta \in \mathcal{K}$  gilt:

$$(z |\alpha\rangle\langle\beta|)^+ = \overline{z} |\beta\rangle\langle\alpha|.$$

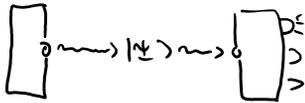
Bew.:  $\overline{\langle e_i | (z|\alpha\rangle\langle\beta|) | e_j \rangle} = \bar{z} \langle e_i | \alpha \rangle \langle \beta | e_j \rangle = \langle e_j | (z|\beta\rangle\langle\alpha|) | e_i \rangle \quad \square$

Ein Operator  $A$  ist selbst-adj. oder hermitesch wenn  $A = A^\dagger$ .

Beh.: Ein Operator ist hermitesch  $\Leftrightarrow E_s$  ist eine Observable.

Bew.: Hausaufgabe.

Wir haben bislang angenommen, dass sich das Quantensystem zwischen Präparation und Messung nicht verändert. Im Allg. ist



$$|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$$

zeitabhängig.

Klassisch wird Zeitentwicklung durch die Hamiltonsche Gl. beschrieben:

$$\partial_t \vec{x}(t) = \mathcal{J} \vec{\nabla} H(\vec{x}(t)), \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{bmatrix}.$$

$H = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + V(\vec{q})$  ist die Hamiltonfunktion = Gesamtenergie.

In der QM postulieren wir:

⑤ (Axiom 0-④ → evor...) Jedem System ist eine Observable  $H$  zugeordnet - der Hamiltonoperator oder Hamiltonian - der Energiemessungen beschreibt.

⑥ Die Bewegungsgleichung der QM ist die Schrödingergl.:

$$(*) \quad \partial_t |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H |\psi\rangle.$$

Wie die Hamiltonschen Gleichungen, ist die Schrödingergleichung eine lineare gewöhnliche DGL erster Ordnung. D.h. dass der Zustandsvektor zu einem Zeitpunkt die Zeitentwicklung für alle Zeiten festlegt.

(Mathematisch betrachtet ist die Struktur der Schrödingergleichung und der Hamiltongleichung sehr ähnlich. Man kann auf der Einheitssphäre des Hilbertraums eine "symplektische Struktur" einführen, bezüglich derer die Multiplikation mit der imaginären Einheit der Multiplikation mit der symplektischen Matrix entspricht. In diesem Sinn ist die Schrödingergleichung eine Hamiltonsche Gleichung - mit dem Hilbertraum als Phasenraum. Die Ähnlichkeiten enden dann aber schnell: Die Interpretation der Elemente des klassischen Phasenraums unterscheidet sich deutlich von der Interpretation der Hilbertraumvektoren.)

Eine "formale" Lsg der Schrödinger-Gl. ist einfach hinzuschreiben:

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)H} |\psi(t_0)\rangle,$$

wobei  $|\psi(t_0)\rangle$  Anfangsbed. sind, und die Exponentialfkt. eines Operators als Potenzreihe definiert ist:

$$(*) \quad e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$$

Bew.: 
$$\begin{aligned} \partial_t |\psi(t)\rangle &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \partial_t \left( \frac{t-t_0}{i\hbar} \right)^k H^k |\psi(t_0)\rangle \\ &= \underbrace{\frac{1}{(k-1)! i\hbar} \left( \frac{t-t_0}{i\hbar} \right)^{k-1} H^k}_{\frac{1}{(k-1)! i\hbar} \left( \frac{t-t_0}{i\hbar} \right)^{k-1} H H^{k-1}} \sum_{k=1}^{\infty} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} H e^{\frac{1}{i\hbar} (t-t_0) H} |\psi(t_0)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H |\psi(t)\rangle. \quad \square \end{aligned}$$

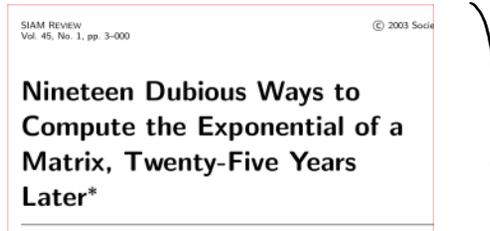
Der Operator

$$U(s) := e^{\frac{1}{i\hbar} s H} : |\psi(t_0)\rangle \mapsto |\psi(t_0+s)\rangle$$

ist der Zeitentwicklungsoperator (time evolution operator).

War es das? Leider nein! Die unendliche Reihe (\*) kann man nicht direkt auswerten.

(lustige  
Lektüre  
dazu:



Zur Lsg.: Sei

$$(S) \quad H = \sum_i E_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

Dann ist

$$\begin{aligned} U(s) |\phi_i\rangle &= \sum_k \frac{1}{k!} \left( \frac{s}{i\hbar} \right)^k H^k |\phi_i\rangle \\ &= \left( \sum_k \frac{1}{k!} \left( \frac{E_i s}{i\hbar} \right)^k \right) |\phi_i\rangle = e^{-i \frac{E_i}{\hbar} s} |\phi_i\rangle. \end{aligned}$$

Entwickeln wir also

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |\phi_i\rangle$$

in der Eigenbasis des Hamiltonian, folgt

(\*)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t_0) e^{-i \frac{E_i}{\hbar} (t-t_0)} |\phi_i\rangle.$$

Dies ist eine explizite Lsg. der Schrödingergl., die uns zur Verfügung steht, sobald wir die Spektralzerlegung (S) des Hamiltonians kennen. Diese zu finden ist in der Praxis das Hauptproblem.

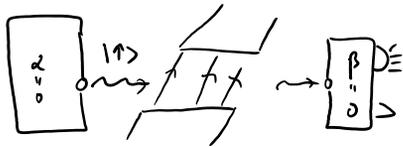
Dazu muss die Eigenwertgl.

(\*)

$$H |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle$$

für die  $E_i$  und  $|\phi_i\rangle$  gelöst werden. Weil (\*) so wichtig ist, heisst sie die stationäre Schrödingergl.

Bsp: Larmor-Präzession



Homogenes  $\vec{B}$ -Feld

Hamilton-Op. für Spin im  $\vec{B}$ -Feld:

$$H = -\gamma \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar}{2} \sigma_i B_i = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}.$$

$=: S_i$

Betrachte:  $\vec{B} = \begin{pmatrix} B \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \rightarrow H = -B \gamma \frac{\hbar}{2} \sigma_x.$

•  $|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$

Damit:

$$\sigma_x = \underbrace{|\uparrow_{\pi/2}\rangle \langle \uparrow_{\pi/2}|}_{= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}} - \underbrace{|\downarrow_{\pi/2}\rangle \langle \downarrow_{\pi/2}|}_{= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}} \Rightarrow |\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_{\pi/2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow_{\pi/2}\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\omega/2 t} |\uparrow_{\pi/2}\rangle + e^{+i\omega/2 t} |\downarrow_{\pi/2}\rangle \right)$$

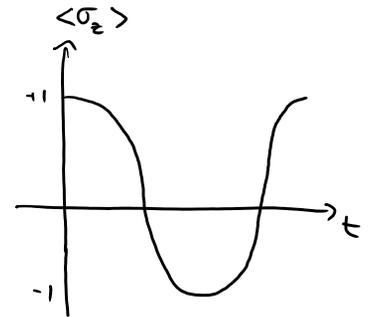
$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\omega/2 t} + e^{+i\omega/2 t} \\ e^{i\omega/2 t} - e^{-i\omega/2 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(-\omega/2 t) \\ i \sin(-\omega/2 t) \end{pmatrix},$$

mit  $\omega := -\gamma B$  die Larmor-Frequenz.

$$\Rightarrow \langle \sigma_z \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t) | \sigma_z | \psi(t) \rangle$$

$$= \cos^2(-\omega/2 t) - \sin^2(-\omega/2 t)$$

$$= \cos(\omega t)$$



Analog:  $\langle \sigma_y \rangle_{\psi(t)} = \sin(\omega t)$

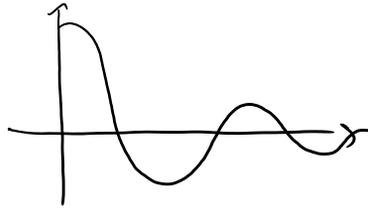
$$\langle \sigma_x \rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{2}$$

$$\leadsto \begin{pmatrix} \langle \sigma_x \rangle \\ \langle \sigma_y \rangle \\ \langle \sigma_z \rangle \end{pmatrix} \hat{=} \begin{array}{c} z \\ \circlearrowleft \\ y \\ \circlearrowright \\ x \end{array}$$

In einem homogenen Magnetfeld  $\parallel$  zur x-Achse beschreibt der Vektor der Spin-Erwartungswerte also eine Rotation um die x-Achse. Das erinnert an die Präzession eines Kreisel im Schwerfeld.

Man mache sich bewusst, dass der Vektor der Spin-Erwartungswerte Daten enthält, die nicht direkt gleichzeitig messbar sind! Die i-te Komponente sagt, welcher Mittelwert sich ergeben würde, wenn man die i-te Spinrichtung t Zeiteinheiten nach der Präparation wiederholt messen würde. Der Vektor beschreibt also das asymptotische Verhalten von drei unterschiedlichen Experimenten! Ob es auch ein einziges Experiment gibt, das uns gleichzeitigen Zugriff auf alle Komponenten ermöglicht, können wir im Moment nicht sagen (wir werden später sehen, dass das nicht möglich ist, nicht einmal in einer hypothetischen Theorie, die allgemeiner als die QM ist!!).

Die Larmor-Präzession findet z.B. in der Kernspinresonanzspektroskopie (*nuclear magnetic resonance - NMR*) Anwendung. Dort werden Atomkerne einem starken homogenen Magnetfeld ausgesetzt. Nach einer Zeit, richten sich die Spins der Atomkerne parallel zum Feld aus, um die Energie zu minimieren ("Polarisation"). Die Larmor-Frequenz der Kerne hängt vom Spin des Kerns sowie vom B-Feld am Kern ab. Letzteres wiederum wird z.B. von der Elektronen-Konfiguration, also von den chemischen Eigenschaften der Probe beeinflusst. So ergeben sich charakteristische Larmor-Frequenzen, die z.B. von den Isotopen in der Probe abhängen. Zunächst beobachtet man aber keine Präzession, da die Spins, wie gesagt, parallel zum Feld stehen. Um das zu ändern, strahlt man ein Mikrowellensignal mit Frequenz in der Nähe einer der Larmorfrequenzen ein. Sobald wir Störungstheorie behandelt haben, werden wir ausrechnen können, dass ein solches resonantes Signal die Spins aus der Ruhelage ablenkt (das sind *Rabi-Oszillationen*). Ein sogenannter  $\pi/2$ -Puls stellt sie senkrecht zum äußeren Feld, und es setzt die Präzession ein, die wir oben ausgerechnet haben. Dadurch wird eine EM-Welle abgestrahlt, die durch Spulen aufgefangen und analysiert wird. Z.B. interessiert man sich für die *Relaxationszeit*, also die Zeit, nach der die Spins wieder in den Grundzustand übergehen. Diesen Prozess nennt man *Dekohärenz*, und wir werden uns ihm später zuwenden...



Larmor-Prä.  
mit  
Dekohärenz.

Das Heisenberg-Bild

↳ Hausaufgabe

Wir betrachten Teilchen mit Masse  $m$ , dass sich entlang einer Dimension bewegen kann.

Axiom Der zugeordnete HR ist

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \Psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \|\Psi\|^2 = \int dx |\Psi|^2 < \infty \right\}$$

Um die physik. Bedeutung von Wellenfkt.  $|\Psi\rangle \in L^2(\mathbb{R})$  zu verstehen, müssen wir Messungen phys. Größe beschreiben.

### ① Ortsmessungen

Axiom (Bornsche Regel) Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Zstd.  $|\Psi\rangle$  im Intervall  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  zu finden, ist

$$\int_a^b dx |\Psi(x)|^2.$$

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion muss also über eine Region integriert werden, damit man eine Wahrscheinlichkeit erhält. Man nennt das Betragsquadrat daher die *Wahrscheinlichkeitsdichte*. (Das hat nichts mit QM zu tun - Wahrscheinlichkeitsdichten werden klassisch benutzt, um die Verteilung kontinuierlicher Zufallsvariablen zu beschreiben).

In der Alltagssprache wird nicht immer streng zwischen Dichte und Wahrscheinlichkeit unterschieden. Man hört schon mal Ausdrücke wie "das Betragsquadrat der Wellenfunktion bei  $x$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen am Ort  $x$  zu finden". Oder, etwas mysteriöser, die Wahrscheinlichkeit sei " $|\Psi(x)|^2 dx$ ". Beides muss als Kurzsprechweise für das obige Integral verstanden werden.

Übrigens: Im Gegensatz zu Wahrscheinlichkeiten, können Wahrscheinlichkeitsdichten größer als 1 sein - oder sogar divergieren. Solange sie das nur in kleinen Bereichen tun, so dass das Integral über jedes Intervall weiterhin den Wert 1 nicht überschreitet, ist dies kein Problem.

Misst man den Ort von vielen Teilchen, die jeweils im Zstd.  $|\Psi\rangle$  präpariert sind, tendiert der Mittelwert

der Messungen zum Erwartungswert

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 x = \langle \Psi | X | \Psi \rangle = \langle X \rangle_{\Psi}$$

mit dem

Ortsoperator  $X: (X\Psi)(x) = x\Psi(x)$

Der Ortsop. ist also die Observable für Ortsmessungen.

Er ist selbstadjungiert:

$$\langle \Psi | X \phi \rangle = \int \overline{\Psi(x)} (x \phi(x)) = \int \overline{(x \Psi(x))} \phi(x) = \langle X\Psi | \phi \rangle.$$

Was ist die Eigenbasis des Ortsoperators? EW-Gl.:

$$X\phi = \lambda\phi \Leftrightarrow \forall x: X\phi(x) = x\phi(x) = \lambda\phi(x).$$

Genaue dann erfüllbar, wenn  $\phi$  nur an einem Punkt von 0 verschieden ist: Wähle  $x_0 \in \mathbb{R}$ ,  $c \in \mathbb{C}$  und setze

$$\phi_{x_0}(x) = \begin{cases} c & x = x_0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\Rightarrow X\phi_{x_0} = x_0\phi_{x_0}.$$

Leider haben solche Fkt. Norm = 0:

$$\|\phi_{x_0}\|^2 = \int_{\mathbb{R} \setminus \{x_0\}} 0 \, dx = 0. \quad \ddot{!}$$

Oft ist es von Vorteil, statt nur mit Elementen aus  $L^2(\mathbb{R})$ , auch mit  $\delta$ -Distributionen zu arbeiten:

$$\delta_{x_0}(x) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \text{"00"} & x = x_0 \end{cases}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \delta_{x_0}(x) \psi(x) := \psi(x_0).$$

Es macht dann Sinn,  $\delta_{x_0}$  als "verallgemeinerten E.-V." des Ortsoperators aufzufassen.

Im endlich-dim. Fall war  $|\langle \text{inneres Produkt} \rangle|^2$  zwischen Zstd. und Eigenbasis-Vektor eine Observable = Wahrscheinlichkeit des Ereignisses. Für den Ortsope. und  $\delta$ -Fkt. erhält man die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\langle \delta_{x_0} | \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | \delta_{x_0} \rangle|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} dx \, \overline{\psi(x)} \delta_{x_0}(x) \right|^2 = |\psi(x_0)|^2.$$

Konvention: Für  $x_0 \in \mathbb{R}$ , schreibe  $|x_0\rangle := |\delta_{x_0}\rangle$ . Meistens benutzt man das Symbol  $x$  direkt  $\rightsquigarrow |x\rangle$ .

## Ⓟ Impulsmessungen

Axiom (erst mal mysteriös): Die Observable für Impulsmessungen ist gegeben durch den linearen (Differential-) Operator

$$P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (\dots \text{OK?!?})$$

Eigenwertgleichung:

$$\begin{aligned} P \phi &= p \phi \quad \Leftrightarrow \quad \forall x: -i\hbar \phi'(x) = p \phi(x) \\ &\Leftrightarrow \quad \phi(x) = A \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right) \end{aligned}$$

$$\text{Norm: } \|\phi\|^2 = |A|^2 \int_{\mathbb{R}} 1 \, dx = \infty.$$

Bei der Behandlung des Ortsoperators hatten wir das Problem, dass die Eigenfunktionen Norm = 0 hatten. Für den Impulsoperator ergibt sich ein "duales" Problem: die Eigenfunktionen haben Norm unendlich. Sie sind damit keine Elemente des Hilbertraums der quadratintegrierbaren Funktionen. Auch hier ist es in der Praxis nützlich, sich darüber nicht allzu viele Gedanken zu machen, solange unsere Vorhersagen für physikalische Größen endlich bleiben.

Wenn Ihnen dieser (in der Physik verbreitete) pragmatische Umgang mit technischen Schwierigkeiten unbefriedigend erscheint, hilft ein Lehrbuch zur Funktionalanalysis. So kann man konzeptionelle Klarheit wieder herstellen. (Allerdings stellt sich heraus, dass man keine wesentlichen physikalischen Effekte übersieht, wenn man das Funk-Ana-Buch im Regal stehen läßt. Das ist nicht selbstverständlich! Mathematische Schludrigkeit kann zu echten Problemen führen. Die Erfahrung zeigt aber, dass es in diesem Fall OK ist).

Wir wählen die Normalisierung  $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$  (Grund: gleich), und definieren die Impulseigenfkt. zum E.W.  $p \in \mathbb{R}$  als

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right)$$

und schreiben i.d. R.  $|p\rangle := |\phi_p\rangle$ .

Diese Kurzschreibweise ist verbreitet und sehr suggestiv. Sie kann auch zu Verwirrung führen. Was ist  $|5\rangle$ ? Ist es  $|p=5\rangle$

oder  $|x=5\rangle$ ? Das muss aus dem Kontext klar werden.

Natürlich können wir an der Stelle die Ket-Verzierung nicht mehr weglassen. Also: bisher haben wir zwischen  $\psi$  und  $|\psi\rangle$  nicht unterschieden. Aber  $|p\rangle$  kann man nicht als  $p$  schreiben, da das als reelle Variable und nicht als Vektor gelesen würde... hier ist die Mathematik klar im Vorteil, wo es üblich ist, den Typ aller Objekte direkt anzugeben, und nicht aus notationellen Konventionen abzulesen.

Zur Interpretation hilft folgende Rechnung:

$$\begin{aligned}\langle p | \Psi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \Psi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{\Psi}\left(-\frac{p}{\hbar}\right)\end{aligned}$$

wobei

$$\tilde{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \Psi(x)$$

die übliche Fourier-Transformation ist.

Die inverse FT ist bekanntlich durch

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{\Psi}(k)$$

gegeben. Erinnerung: Es gelten:

- Satz von Parseval

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int dx \overline{\Psi(x)} \Phi(x) = \int dk \overline{\tilde{\Psi}(k)} \tilde{\Phi}(k)$$

(Innen Produkte können im Frequenzraum wie im Ortsraum berechnet werden).

- Ü-Blatt 4:

$$\widetilde{\frac{\partial}{\partial x} \Psi}(k) = i k \tilde{\Psi}(k)$$

Damit:

$$\begin{aligned} \langle P \rangle_{\Psi} &= \int dx \overline{\Psi(x)} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \\ &= \int dk \overline{\tilde{\Psi}(k)} \hbar k \tilde{\Psi}(k) \\ &= \int dk \hbar k |\tilde{\Psi}(k)|^2 \end{aligned}$$

$$(A = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}) \quad \Rightarrow \quad \int dk \hbar k |\langle p = \hbar k | \Psi \rangle|^2 = \int dp p |\langle p | \Psi \rangle|^2.$$

$\Rightarrow |\langle p | \Psi \rangle|^2$  ist Wahrscheinlichkeitsdichte der Impulsverteilung.

Wir stellen also fest, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte der Ortsverteilung durch den Betragsquadrat der Wellenfunktion in Ortsdarstellung gegeben ist; und die Wahrscheinlichkeitsdichte der Impulsverteilung durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion in der Fourierdarstellung.

### Heisenberg'sche Unschärferelation

Wir haben gesehen, dass Orts- und Impulsverteilung nicht unabhängig voneinander gewählt werden. Sie werden beide aus der Wellenfkt.  $\Psi(x)$  abgeleitet. Was weiß man über  $|\langle p | \Psi \rangle|^2$ , wenn  $|\langle x | \Psi \rangle|^2$  vorgegeben ist? Ein Zusammenhang: Die Verteilungen können nicht gleichzeitig "scharf" sein.

Anmerkung: Wir werden dazu gleich die *Heisenbergsche Unschärferelation* herleiten. Sie ist die bekannteste, aber bei weitem nicht die einzige Unschärferelation. Erinnern Sie sich, dass wir gleich zu Beginn der VL, aus nichts mehr als der Geometrie des Kreises, eine erste Unschärferelation für Spin-Messungen hergeleitet haben.

Dazu: (Klassische Wahrscheinlichkeitstheorie: Varianz)

Sei  $Z$  eine reellwertige Zufallsvariable.

Sei  $Z$  eine reellwertige Zufallsvariable.

Die Varianz ist die durchschnittliche quadratische Abweichung vom Mittelwert:

$$\text{Var}(Z) = \mathbb{E}[(Z - \mathbb{E}[Z])^2]$$

wobei für jede Funktion  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  der Erwartungswert durch

$$\mathbb{E}[f(Z)] = \int_{\mathbb{R}} \underbrace{p(z)}_{\text{Wahrscheinlichkeitsdichte bei } z} f(z)$$

gegeben ist.

Eigenschaften:

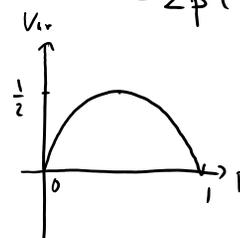
①  $\text{Var} Z = \mathbb{E}[Z^2] - \mathbb{E}[Z]^2$

②  $\text{Var}(Z) = 0 \Leftrightarrow Z$  nimmt genau einen Wert mit  $p=1$  an.

Bsp.:  $\Pr[Z=+1] = p, \Pr[Z=-1] = 1-p.$

$\leadsto p(z) = p \delta_{+1}(z) + (1-p) \delta_{-1}(z),$

$$\left. \begin{aligned} \mathbb{E}[Z] &= p \cdot 1 + (1-p) \cdot (-1) = 2p - 1 \\ \mathbb{E}[Z^2] &= p \cdot 1 + (1-p) \cdot (-1)^2 = 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \text{Var}[Z] &= (2p-1)^2 - 1 \\ &= 4p^2 - 2p \\ &= 2p(p-1) \end{aligned}$$





In der QM ist die Varianz bei der Messung von Obs.  $A$  am Zstd.  $|\psi\rangle$  also so gegeben:

$$\text{Var}_\psi(A) = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2$$

Es gilt:

$$\text{Var}_\psi(X) \cdot \text{Var}_\psi(P) \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Bew.: ① "Zentrieren"

$$\tilde{X} := X - \langle X \rangle \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle \tilde{X} \rangle = 0 \\ \langle X^2 \rangle = \langle X^2 - 2X\langle X \rangle + \langle X \rangle^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \text{Var}(X). \end{cases}$$

② "Bilde positiv semi-definiten Operator"  
(psd)

$$\left[ \begin{array}{l} \text{psd} \\ \text{Für alle Operatoren } A, \text{ Zstd. } |\phi\rangle \text{ gilt:} \\ \langle \phi | A^\dagger A | \phi \rangle = \langle A\phi | A\phi \rangle = \|A\phi\|^2 \geq 0. \\ \text{(Man nimmt Op. der Form } AA^\dagger \text{ psd.)} \end{array} \right]$$

Für  $\lambda \in \mathbb{R}$ , setze:

$$A = (\tilde{P} - i\lambda \tilde{X})$$

$$\Rightarrow \langle AA^\dagger \rangle = \langle (\tilde{P} - i\lambda \tilde{X})(\tilde{P} + i\lambda \tilde{X}) \rangle$$

$$= \langle \tilde{X}^2 \rangle \lambda^2 + \underbrace{i\lambda \langle [\tilde{P}, \tilde{X}] \rangle}_{= \lambda \hbar} + \langle \tilde{P}^2 \rangle \geq 0 \quad (*)$$

### ③ Diskriminanten-Trick

(\*) ist Polynom in  $\lambda$ , das keine, oder eine doppelte Nullstelle hat (sonst würde es neg. werden).

$$\Leftrightarrow \text{Diskriminante } b^2 - 4ac \leq 0$$

abc-Formel  
 $a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$

bei  
 $\lambda_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$

Äq.: Teile durch a  
 und nutze pq.

$$\Leftrightarrow \langle \tilde{X} \rangle \langle \tilde{P} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

□

Zur Interpretation: TBD.

Klassisch hat ein Punktteilchen mit Masse  $m$  in einer Dimension unter Wirkung eines Potentials  $V(x)$  die Hamiltonfkt.

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

Unter kanonischer Quantisierung versteht man die heuristische Regel, nach der man den Hamilton-Operator eines Systems erhält, in dem man in der Hamilton-Fkt. die Variable  $x$  durch den Ortsop.  $X$ , und  $p$  durch  $P$  ersetzt.

Spektralkalkül

Sei  $f$  eine Fkt., die durch eine Potenzreihe gegeben ist

$$f(x) = \sum_n c_n x^n.$$

Sei nun  $A$  ein Operator. Dann def. wir

$$f(A) = \sum_n c_n A^n. \quad (*)$$

Wenn  $A$  selbstadjungiert ist, also

$$A = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

ist

$$f(A) = \dots = \sum_i f(\lambda_i) |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (\Delta)$$

Statt  $(*)$  kann man auch  $(\Delta)$  als Def. von "Fkt. von Operator" nehmen. So wird diese auch auf ...

+kt. ausgeweitet, die keine Potenzreihe besitzen.

Den Ansatz (Δ) nennt man in der Funktionalanalysis "Spektralkalkül".

Laut (Δ) kann man Ausdrücke wie  $A^2$  oder  $A^{-1}$  nach Belieben als Operatorquadrat / -inverses, oder im Spektralkalkül als Quadrat / Inverses der E.W. lesen - das Ergebnis ist das gleiche.

... für das Teilchen im Potential  $V$  ist also der kanonisch quantisierte Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X), \quad H \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)$$

Da die Operatoren  $X$  und  $P$  nicht vertauschen, ist die kanonische Quantisierungsregel wie oben gegeben nicht immer eindeutig. Wenn  $H(x,p)=xp$  ist, ist nicht klar, ob wir  $H=XP$  oder  $H=PX$  oder  $H=1/2(XP + PX)$  setzen sollen. Hier gibt es keine einfache, allgemeingültige Regel. Für diese VL wird das Problem aber nicht auftauchen.

Beispiele:

① Das "freie Teilchen":  $V(x)=0$

Die stationäre Schrödingergl. ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x)$$

wird für beliebiges  $E > 0$  durch

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

gelöst.

Äquivalent:  $H = \frac{P^2}{2m} \rightsquigarrow H|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$ , also sind die Eigenfunktionen von  $H$  (nur bei  $V=0!$ ) zu  $E$  durch die bekannten Impuls-Eigenfkt.  $|p\rangle$ ,  $p = \pm\sqrt{2mE}$  gegeben.

Zur Interpretation:

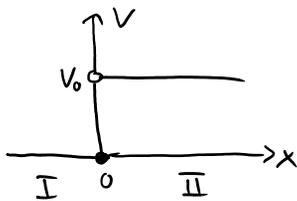
Wie die Eigenfunktionen des Impuls sind also auch die des freien Teilchens nicht normierbar. Wir ignorieren das Problem fürs erste. Die Eigenfunktionen  $|p\rangle$  beschreiben Lösungen, die Impuls  $p$  haben, und deren Aufenthaltswahrscheinlichkeit im ganzen Raum konstant ist. Man kann sich diese Lösungen in Analogie zu "stationären Strömungen" von Flüssigkeiten verstehen: auch dort gibt es einen nicht-verschwindenden Impuls, obwohl die Dichte der Flüssigkeit als Funktion von Raum und Zeit konstant ist.

Natürlich kann man in der Quantenmechanik auch Lösungen finden, bei der sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens mit fester Geschwindigkeit fortbewegt. Schließlich gibt es gleichförmige Bewegung sicher klassisch, und im Limes großes Systeme müssen wir die Vorhersagen der klassischen Mechanik - die wir ja empirisch überprüft haben! - wiedergewinnen.

Die wichtigste Lösung dieser Art stellen die Gaußschen Wellenpakete da. Diese werden Sie auf einem Übungszettel im Detail analysieren.

Für nicht-triviale Potentiale lassen sich dynamische Lösungen in der Regel nicht mehr analytisch beschreiben. In einer Dimension kann man dies aber recht leicht auf dem Computer simulieren. Wir werden später Beispiele dazu sehen.

## II Die Potentialstufe

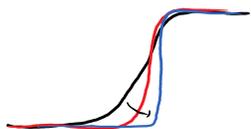


Wir betrachten das stückweise konstante Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

Die Fkt.  $V$  ist nicht differenzierbar, und daher nicht die Stammfkt. einer Kraft, also kein physikalisches Potential.

$V$  ist als Grenzwert immer steilerer Übergänge zu verstehen:



Man kann zeigen, dass man unter folgenden Regularitätsbed.  
physikalische Lsg zu stückweise konstanten Potentialen erhält:

- ①  $\Psi$  ist diff.-bar ( $\Rightarrow$  stetig)
- ②  $\Psi'$  stetig
- ③  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |\Psi(x)| < \infty$ .

Mit ①, ② können wir Schröd.-gl. auf den Gebieten I und II  
getrennt lösen, und dann "anpassen":

Bei I: Wie für das freie Teilchen:

$$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Bei II: Betrachte den Fall  $E < V_0$ . (Anderer Fall  $\rightarrow$  Hausaufgabe)

$$\phi(x) = C e^{\lambda x} + D e^{-\lambda x} \quad \lambda = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Regularitätsbed.:

$$\text{③} \Rightarrow C = 0.$$

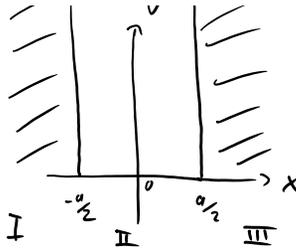
$$\begin{cases} \text{①} \Rightarrow A + B = D \\ \text{②} \Rightarrow ikA - ikB = \lambda D \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\lambda}{k}\right) D \\ B = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\lambda}{k}\right) D \end{cases}$$

Interpretation:

III) Kastenpotential 

III

Kastenpotential



Wir betrachten Gebiet I der Länge  $a$  mit Potential  $V=0$ .

Ausschhalb des Gebiets ist  $V=V_0$ .

Nach (II) dringt die Wellenfunktion etwa  $\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$  weit nach II / III ein. Schickt man für beschränktes  $E$  das Potential  $V_0 \rightarrow \infty$ , erhält man also Lösungen mit

$$\phi(x) = 0 \quad |x| \geq \frac{a}{2}$$

$\leadsto$  Teilchen ist "im Kasten gefangen".

Dort:  $\phi_{II}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$   
 $= A' \sin(kx) + B' \cos(kx)$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Stetigkeit:  $\phi_{II}(\pm \frac{a}{2}) = 0$

$\Rightarrow A' = 0$  oder  $B' = 0$   
 (cos symm. / sin anti-symm.)

$$\cos(\pm k \frac{a}{2}) = 0$$

$$\Leftrightarrow ka = 2m' \pi \quad m' \in \mathbb{N}$$

$$\Leftrightarrow ka = m \pi \quad m \text{ gerade, } \geq 2$$

$$\sin(\pm k \frac{a}{2}) = 0$$

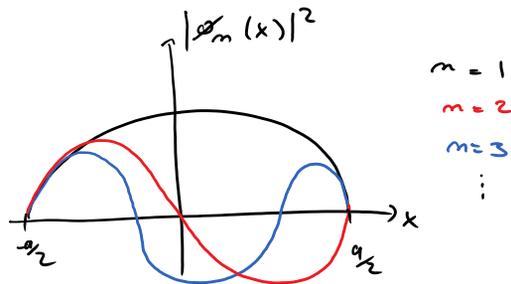
$$\Leftrightarrow k \frac{a}{2} = (m' + \frac{1}{2}) \pi \quad m' \in \mathbb{N}$$

$$\Leftrightarrow ka = \underbrace{(2m'+1)}_{=m \text{ ungerade, } \geq 1} \pi$$

$\Downarrow$

$$k = \frac{m \pi}{a} \quad m \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow \boxed{E} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \boxed{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} m^2} \quad m \in \mathbb{N}$$



Die Randbedingungen sorgen dafür, dass die Energieeigenwerte nicht mehr kontinuierlich sind, sondern nur diskrete Werte annehmen können. Diese "quantelungen" geben der Theorie ihren Namen.

Man kann zeigen: Diskrete Energieeigenwerte sind verbunden mit *gebundenen Lösungen*, als Eigenfunktionen, die im Unendlichen gegen Null gehen. Wenn man eine Wellenfunktion als Überlagerung solcher gebundenen Lösungen ausgedrückt werden kann, wird sie also für alle Zeiten in einem beschränkten Bereich verbleiben.

Im Gegensatz dazu, sind kontinuierliche Energieeigenwerte mit *Streulösungen* assoziiert, Wellenfunktionen, die sich über den gesamten Raum erstrecken, und die daher nicht normalisierbar sind. Das primäre Beispiel sind die ebenen Wellen, die Energieeigenfunktionen für freie Teilchen auftreten.

Wenn das Kastenpotential eine endliche Höhe hat, erhält man für geringe Energien weiterhin gebundene Lösungen und diskrete Eigenwerte. Für hohe Energien wird das Spektrum dann kontinuierlich und die Eigenfunktionen entsprechen Streulösungen. (Das können Sie recht leicht nachrechnen!)

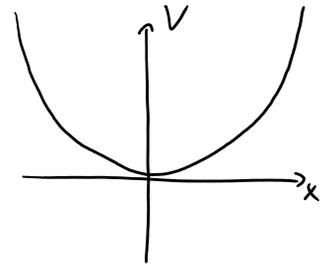
④ Potentialbarriere, Tunneleffekt

↳ Hausaufgabe

⑤ Dynamik

↳ Julia + Python-Code auf Website.

Erinnerung: Teilchen im quadratischem Potential  
 $V(x) = c x^2$  heißt harmonischer Osz.

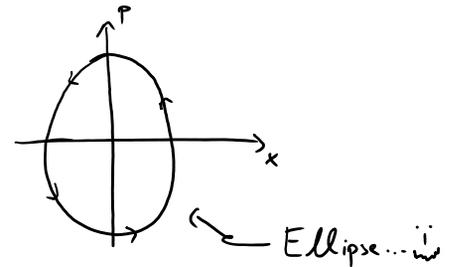


Hamiltonfunktion hat Form

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Lösung:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{m\omega}} E \cos(\omega t - \phi) \\ \sqrt{2m} E \sin(\omega t - \phi) \end{pmatrix}$$



Wichtigstes Modellsystem der Physik!

Gründe:

- (Physik): Nähert Bewegungen um Ruhelage:

Bsp.:

Lennard-Jones-Potential  
zwischen neutralen  
Atomen



- Atome in Molekülen
- Ionen in Kristallen
- 

- (Physik): Beschreibt Moden nicht wechselwirkender Felder.
- (Mathe/pragmatisch): Gekoppelte Osz. ist reichste Klasse von klass./quantenm. Systemen, die explizit lösbar sind.

QM Behandlung

Bisherige 1D Potentialprobleme haben wir behandelt, indem wir direkt die Differentialgleichung gelöst, und so die Wellenfunktionen in Ortsdarstellung erhalten haben. Das geht für den harmonischen Oszillator im Prinzip auch (wenn man Hermite-Polynome mag...), ist aber nicht die bevorzugte Methode.

Stattdessen ist unser Ziel, so viele physikalische Eigenschaften des harmonischen Oszillators wie möglich zu finden, in dem wir nur die "algebraischen Eigenschaften" des Orts- und Impulsoperators nutzen - im Wesentlichen die kanonische Vertauschungsrelation - ausnutzen.

Das Programm ist überaus erfolgreiche! Die Lösung der stationären Schrödingergleichung, sowie viel physikalische Eigenschaften der Energieeigenzustände können durch eine Reihe elementarer Argumente aus der linearen Algebra gewonnen werden. Differentialgleichungen und explizite Wellenfunktionen spielen so gut wie keine Rolle. Diese Herangehensweise - den Hilbertraum zu vermeiden und stattdessen mit der Algebra der Operatoren zu arbeiten - ist die Grundlage der Quantenvielteilchentheorie und der Quantenfeldtheorie.

Erfahrungsgemäß finden Studierende diese Methoden beim ersten Kontakt abschreckend. Sie ist abstrakter als die expliziten Wellenfunktionen des letzten Kapitels. Auch sind Differentialgleichungen mathematisch zwar komplexer als die hier benötigten Argumente der linearen Algebra - die Lösungsmethoden für Differentialgleichungen sind vielen Studierenden aber präsenter.

Also, wenn das Folgende erst abstrakt und abschreckend wirkt: Lassen Sie sich drauf ein und glauben Sie mir, dass es, wenn man sich an die Art zu denken gewöhnt hat, tatsächlich *leichter* ist, als die bisherigen Themen! (Und in jedem Fall sind die folgenden Methoden für Ihren weiteren Fortschritt in der Physik zentral wichtig!)

Setze:

$$\tilde{X} := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X, \quad \tilde{P} := \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P$$

Damit:

$$\textcircled{1} H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega X^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2)$$

$$\textcircled{2} [\tilde{X}, \tilde{P}] = \frac{1}{\hbar} [X, P] = i$$

Wichtiger Trick: Setze

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} + i \tilde{P}) && \text{"Vernichter"} \\ \Rightarrow a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} - i \tilde{P}) && \text{"Erzeuger"} \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} a \\ \Rightarrow a^\dagger \end{aligned}} \right\} \begin{array}{l} \text{"Leiteroperatoren"} \\ \text{(Grund \(\leadsto\) später)} \end{array}$$

Damit:

$$\textcircled{1} [a, a^\dagger] = \frac{1}{2} (-i [\tilde{X}, \tilde{P}] + i [\tilde{P}, \tilde{X}]) = \mathbb{1}$$

$$\textcircled{2} \quad a^\dagger a = \frac{1}{2} (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2 + \underbrace{i\tilde{X}\tilde{P} - i\tilde{P}\tilde{X}}_{= i[\tilde{X}, \tilde{P}] = -1})$$

$$\Rightarrow H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

Setze

$N := a^\dagger a$  "Besetzungszahlenoperator" (Grund  $\rightarrow$  später)

Algebraische Lösung:

① Es genügt, EW-Gl. für  $N$  zu lösen:

$$N|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \Leftrightarrow H|\phi\rangle = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) |\phi\rangle = \hbar\omega \left( \lambda + \frac{1}{2} \right) |\phi\rangle.$$

② a) Alle E.W. sind  $\geq 0$ . b)  $N|\phi\rangle = 0|\phi\rangle \Leftrightarrow a|\phi\rangle = 0$ .

( $N = a^\dagger a$  ist positiv semi-definit.)

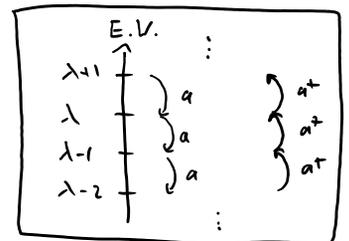
$$N|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \quad \text{mit} \quad \langle \phi | \phi \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \lambda = \langle \phi | N | \phi \rangle = \langle \phi | a^\dagger a | \phi \rangle = \langle a\phi | a\phi \rangle = \|a\phi\|^2 \geq 0,$$

mit Gleichheit  $\Leftrightarrow a|\phi\rangle = 0$ .

③ [Super-wichtiger Trick!!! "Leitern"]

Sei  $|\phi\rangle$  E.V. mit E.W.  $\lambda$ . Dann:



a)  $a^\dagger|\phi\rangle$  ist E.V. mit E.W.  $(\lambda+1)$ ,

b) wenn  $\lambda \neq 0 \Rightarrow a|\phi\rangle$  " " " "  $(\lambda-1)$ .

Bew.: (b)  $[N, a] = a^+ a a - \underbrace{a a^+ a}_{=1+a} = -a$

$\Rightarrow N a |\phi\rangle = (aN - a)|\phi\rangle = a(\lambda - 1)|\phi\rangle = (\lambda - 1) a |\phi\rangle.$

$\|a |\phi\rangle\|^2 = \langle \phi | a^+ a |\phi\rangle = \lambda \| |\phi\rangle \|^2, \text{ für } \lambda \neq 0 \text{ ist also } a |\phi\rangle = 0.$

(a) analog.

④ Die Eigenwerte von  $N$  sind  $\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$ .

Bew.: Sei  $\lambda$  ein E.W. von  $N$ . Durch "Absteigen" erhält man Seq. von E.W.  $\lambda, \lambda-1, \lambda-2, \dots$  die abbricht  $\Leftrightarrow$  wenn man 0 erreicht. Da alle E.W.  $\geq 0$  sind, muss  $\lambda=0$  vorkommen.  
 $\Rightarrow \lambda \in \mathbb{N}_0.$

Umgekehrt, sei  $|\phi_0\rangle$  ein E.V. zum E.W. 0.  $\Rightarrow (a^+)^m |\phi_0\rangle$  ist E.V. zum E.W.  $m$ .  $\rightarrow$  alle natürlichen Zahlen kommen vor.  $\square$

TBD: Interpretation

⑤ Der Eigenraum zu  $\lambda=0$  ist nicht entartet.  
 (Also  $a |\phi_0\rangle = 0$  legt  $|\phi_0\rangle$  bis auf Vielfaches fest).

Bew.: (Einziges Schritt, der konkrete Darstellung braucht!)

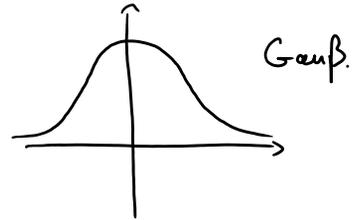
$a \phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} + i\tilde{P}) \phi_0(x)$

$\overline{m\omega} \dots \overline{+} \dots !$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \phi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \phi_0'(x) \stackrel{!}{=} 0$$

(\*)  $\Leftrightarrow \phi_0(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)$

(normalisiert für  $A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$ ).



⑥ Alle Eigenräume sind nicht-entartet.

Bew.: Widerspruchsbeweis. Nehme an,  $\lambda = m$  ist entartet.

$\Leftrightarrow \exists |\phi_m\rangle, |\psi_m\rangle$  s.d.

- $\langle \phi_m | \psi_m \rangle = 0$ ,
- $N |\phi_m\rangle = m |\phi_m\rangle$ ,
- $N |\psi_m\rangle = m |\psi_m\rangle$ .

Behauptung: Dann ist auch  $m-1$  entartet. Denn:

setze  $|\phi_{m-1}\rangle = a |\phi_m\rangle$ ,  $|\psi_{m-1}\rangle = a |\psi_m\rangle$ .

Nach ③ sind beide E.V. zu  $m-1$ . Aber:

$$\langle \phi_{m-1} | \psi_{m-1} \rangle = \langle \phi_m | \underbrace{a^* a}_{=N} |\psi_m\rangle = m \langle \phi_m | \psi_m \rangle = 0.$$

Per Induktion folgt, dass auch  $\lambda=0$  entartet ist

$\leadsto$  Widerspruch. □

Eigenbasis:

Schreibe  $|m\rangle$  für normalisierten E.V. zu  $\lambda = m$ .

Explizit:  $|0\rangle = |\phi_0\rangle$  mit  $\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$ .

Explizite Formeln für die anderen E.V. erhalten wir durch Leiten.

$$\begin{aligned} \text{Dazu: } \|a^+ |m-1\rangle\|^2 &= \langle m-1 | a a^+ |m-1\rangle \\ &= \langle m-1 | 1 + a^+ a |m-1\rangle \\ &= m. \end{aligned}$$

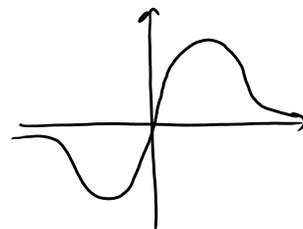
$$\Rightarrow a^+ |m-1\rangle = \sqrt{m} |m\rangle \quad (\text{analog: } a |m\rangle = \sqrt{m} |m-1\rangle)$$

$$\Rightarrow \begin{array}{c} \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} |3\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} \begin{array}{l} \nearrow a^+/\sqrt{3} \\ \nearrow a^+/\sqrt{2} \end{array} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |0\rangle \end{pmatrix} \begin{array}{l} \nearrow a^+/\sqrt{2} \\ \nearrow a^+/\sqrt{1} \end{array} \end{array}$$

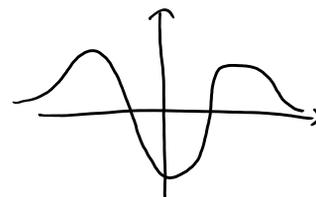
$$\Rightarrow |m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} (a^+)^m |0\rangle$$

Damit (für  $m = \omega = \hbar = 1 \dots$ ):

$$\begin{aligned} \langle x | 1 \rangle &= \langle x | a^+ | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x - \frac{\partial}{\partial x} \right) \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \pi^{-1/4} 2x e^{-\frac{1}{2}x^2} \end{aligned}$$



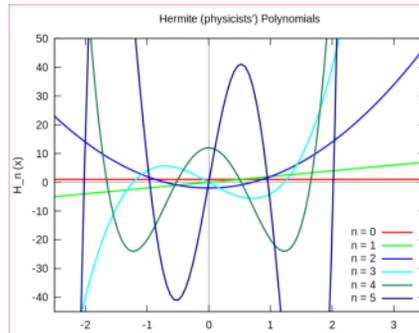
$$\begin{aligned} \langle x | 2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x | a^+ | 1 \rangle = \frac{1}{2} \pi^{-1/4} 2(x^2 + x^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &\vdots \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \langle x | m \rangle &= \frac{1}{\sqrt{m! 2^m}} \pi^{-1/4} \left[ x - \frac{d}{dx} \right]^m e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{m! 2^m}} \pi^{-1/4} H_m(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \underbrace{H_n(x)}_{m\text{-te Hermitepolynom}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$m$ -te Hermitepolynom (Physik-Konvention)



Quelle: Wikipedia, Hermite Polynomials, 5/19.

## Eigenschaften der Eigenzustände

Ich habe die Hermitepolynome nur deswegen angegeben, um Sie abzuschrecken. Unser Ziel wird es immer sein, alle physikalischen Aussagen über den harmonischen Oszillator direkt aus den algebraischen Eigenschaften der Leiteroperatoren zu gewinnen, ohne je eine Wellenfunktion hinschreiben oder, Gott bewahre!, darüber integrieren zu müssen.

Tatsächlich kann man zeigen, dass man alle Operatoren durch Polynome in Leiteroperatoren ausdrücken (oder zumindest annähern) kann (vergl. "CCR algebra"). Daher, und da die Energieeigenzustände eine Basis im Hilbertraum bilden, kann man im Prinzip beliebige Erwartungswerte durch "Leitern" ausrechnen.

Einige Beispiele:

Bsp.: Erwartungswerte und Varianzen:

$$\langle m | \tilde{X} | m \rangle = \langle m | \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) | m \rangle = \sqrt{\frac{m}{2}} \langle m | m-1 \rangle + \sqrt{\frac{m+1}{2}} \langle m | m+1 \rangle = 0.$$

$$\langle m | \tilde{P} | m \rangle = \langle m | \frac{i}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger) | m \rangle = \dots = 0.$$

$\Rightarrow$  Orts- und Impulsverteilung von Eigenzuständen ist symmetrisch.

$$\langle m | \tilde{X}^2 | m \rangle = \frac{1}{2} \langle m | \underbrace{a^2 + a a^\dagger + a^\dagger a + a^{\dagger 2}}_{= 1 + a^\dagger a} | m \rangle = m + \frac{1}{2}.$$

$$\Rightarrow \text{Var}_{|m\rangle}(\tilde{X}) = m + \frac{1}{2} \quad (= \text{Var}_{|m\rangle}(\tilde{P}), \text{ analog}).$$

Orts- und Impulsunschärfe verschwinden nie, sind gleich,

und nehmen mit Energie zu.

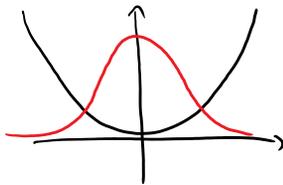
Mit Einheiten:  $\langle X^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \langle \tilde{X}^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n + \frac{1}{2})$

$$\langle P^2 \rangle = \dots = m\omega\hbar (n + \frac{1}{2})$$

Für  $n=0 \rightsquigarrow \text{Var}(X) \cdot \text{Var}(P) = \frac{\hbar^2}{4}$

$\Rightarrow$  Grundzustand  $|n=0\rangle$  des harmonischen Oszillators minimiert Heisenbergsche Unschärferelation!

$\hookrightarrow$  Das ist intuitiv: Um  $\langle V(X) \rangle$  zu minimieren, muss  $|\phi_0(x)|^2$  bei kleinen  $x$  konzentriert sein. Aber in  $H = \frac{1}{2}k\omega(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2)$  gehen Ort- und Impuls symmetrisch ein.  $\Rightarrow |\tilde{\phi}_0(p)|$  muss ebenfalls um  $p=0$  konz. sein. Grundzustand findet best-möglichen Kompromiss.





Dann:

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle(t) = -V(\langle X \rangle(t)).$$

⇒ Für Potentiale vom Grad  $\leq 2$  (Bsp.: freies Teilchen, harm. Oszillator), erfüllen die Erw.-W.  $\langle X \rangle(t)$ ,  $\langle P \rangle(t)$  die klassischen Hamiltongleichungen für  $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ .

Ehrenfest

Anmerkungen:

- Für andere Obs. gilt das nicht. Z.B. zeigt die Übung, dass für das freie Teilchen  $\langle X^2(t) \rangle \sim t^2$  ist (Dispersion).
- Die Vertauschung  $\langle V(X) \rangle \approx V(\langle X \rangle)$  gilt auch dann immer, wenn  $|\psi(x)|^2$  auf einem Gebiet um ein  $x_0$  konzentriert ist, auf dem  $V(x_0 + \delta) \approx V(x_0) + c \cdot \delta$  in guter Näherung linear ist.

Wie ordnet man Systemen Hilberträumen, und physikalischen Größen Operatoren zu?

"Raten und empirisch testen" ist keine falsche Antwort.

Aber praktisch funktioniert "Raten" nur, weil es Prinzipien gibt, die die Menge der möglichen Kandidaten massiv einschränken. Mit Abstand der wichtigste Ansatz besteht in der Analyse von Symmetrien.

Während die Schrödingergleichung für nicht-relativistische Teilchen ohne Spin historisch geraten und im Nachhinein gerechtfertigt wurde, werden Symmetrieüberlegungen immer wichtiger, je fortgeschrittener die Theorie wird. Die Entwicklung der relativistischen Quanten(feld)theorie, z.B., begann mit Symmetrieüberlegungen. Dort spielen sie auch in der Lehre eine große Rolle. In Vorlesungen zur nicht-relativistischen QM werden Symmetrien traditionell weniger systematisch behandelt: Die Hilberträume für spinlose Teilchen, und Operatoren für Ort und Impuls werden einfach axiomatisch eingeführt; die Drehimpulsoperatoren werden zwar über die Eigenschaften der Rotationsgruppe abgeleitet - man vermeidet aber meist, die systematische Theorie dahinter explizit zu erwähnen.

Hier werden wir etwas ausführlicher als üblich über die Hintergründe reden. Eine gute Referenz ist das Lehrbuch von Ballentine.

Erinnerung (TP 1): Es ist Erfahrungstatsache, dass Physik im nicht-relativistischen Regime unter der Galilei-Gruppe invariant ist:

Galilei-Gruppe

|   |   |  |   |
|---|---|--|---|
| $\begin{pmatrix} \vec{r} \\ t \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} R\vec{r} + \vec{v}t + \vec{a} \\ \lambda t + s \end{pmatrix}$ | $\vec{v}, \vec{a} \in \mathbb{R}^3$<br>$R \in O(3)$<br>$s \in \mathbb{R}$ | $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$<br>$\vec{v} \in \mathbb{R}^3$ | <p>Translation des Ursprungs<br/>gleichförmig, geradlinige Beweg.<br/>("Galilei boosts").</p> |
|   |   |  | $R \in O(3) = \{ R \mid R^T R = \mathbb{1}, \det R = 1 \}$<br>Rotation des Raumes             |
|   |   | $s \in \mathbb{R}$                                       | Verschiebung des zeitl. Urspr.  |
|   |   | $\lambda \in \{ \pm 1 \}$                                | Zeitumkehr*   |

\* Natürlich widerspricht unsere alltägliche Erfahrung der Zeitumkehrsymmetrie. Mikroskopisch scheint sie aber zu gelten. Warum wir diese Symmetrie - als einzige der genannten - makroskopisch nicht wahrnehmen, ist eine sehr interessante Frage, auf die es viele Antworten, aber keine einzelne, allgemein akzeptierte gibt. Wir werden das Thema hier nicht weiter beleuchten können. -> TP4.

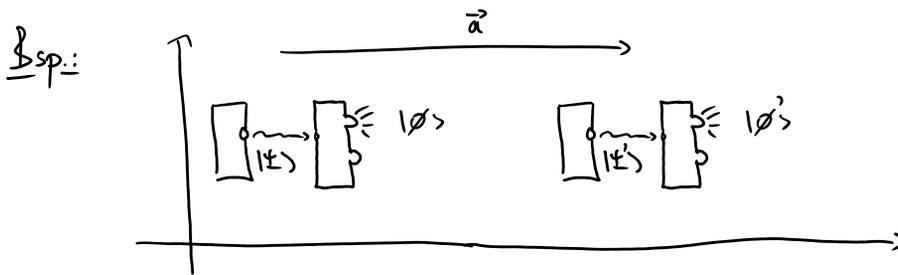
Das bedeutet:

$$\begin{bmatrix} \vec{x}_i \\ \vdots \end{bmatrix} \text{ ist physikalische } \begin{bmatrix} R\vec{x}_i + \vec{v}t + \vec{a} \\ \vdots \end{bmatrix} \text{ ist}$$

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} (t) \quad \text{ist physikalische Trajektorie von } n \text{ Teilchen} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} R\vec{x}_1 + \vec{v}t + a \\ \vdots \\ R\vec{x}_n + \vec{v}t + a \\ R\vec{p}_1 + m_1\vec{v} \\ \vdots \\ R\vec{p}_n + m_n\vec{v} \end{bmatrix} (\lambda t - s) \quad \text{ist phys. Trajektorie}$$

Es liegt nah, anzunehmen, dass auch in der QM zwei Experimente die gleichen Ergebnisse liefern, wenn die Aufbauten sich nur um eine Galilei-Transform. unterscheiden.

Was bedeutet das?



Betrachte Präparation  $|\psi\rangle$  und Messung  $|\phi\rangle$ .

Die Wahrscheinlichkeit, dass mit  $|\phi\rangle$  assoz. Ergebnis zu erhalten, ist

$$\text{Pr}[\phi|\psi] = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$$

Wir betrachten nun das gleiche Exp., um  $\vec{a}$  im Raum verschoben.

Die verschobene Präp. wird durch einen Vektor  $|\psi'\rangle$  dargestellt, die verschobene Messung durch  $|\phi'\rangle$ . Es gilt:

$$|\langle\psi'|\phi'\rangle| = \text{Pr}[\phi'|\psi']$$



Galilei-Invarianz verlangt Gleichheit!

In anderen Worten: Sei  $T_{\vec{a}} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  die Abb., die Zustands- und Messvektoren auf die um  $\vec{a}$  verschobenen abbildet.

Also:  $|\psi'\rangle = T_{\alpha}(|\psi\rangle)$ ,  $|\phi'\rangle = T_{\alpha}(|\phi\rangle)$ .

Dann gilt:

$$(*) \quad |\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle T_{\alpha}(\phi) | T_{\alpha}(\psi) \rangle|^2 \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{X}$$
$$\|\psi\|^2 = \|\phi\|^2 = 1.$$

I

Wir also die Menge der Abbildungen verstehen, die das Betragsquadrat von Skalarprodukten invariant läßt. A priori könnte es sein, dass diese Menge ganz furchtbar ist, also schwer zu charakterisieren und mit "pathologischen" Elemente, die zwar formal (\*) erfüllen, aber physikalisch unbefriedigend sind.

....

Wir haben aber Glück! Es gibt eine einfache Charakterisierung. Sie wurde von Eugene Wigner entwickelt (tatsächlich für den Zweck der Charakterisierung von Symmetrien in der QM).

Satz von Wigner Sei  $T$  wie in (\*). Dann kann  $T$  unitär oder anti-unitär gewählt werden.

Im ersten Fall ist  $T$  also ein linearer Operator mit  $TT^{\dagger} = \mathbb{1}$ .

$T$  erhält also nicht nur das Betragsquadrat, sondern das Skalarprodukt selbst. Dies sind die "offensichtlichen" Lsg. zu (\*), wenn man den Formalismus der QM kennt.

optional

Zum zweiten Fall: Die "Anti-unitären" erhält man so: Wähle eine Basis  $\{|e_i\rangle\}_i \subset \mathcal{X}$ . Sei  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle$ . Def. die Komplexe Konjugation (bzgl. der Basis) als

$$C|\psi\rangle = \sum_i \bar{c}_i |e_i\rangle.$$

$T$  ist anti-unitär  $\Leftrightarrow T = UC$ , mit  $U$  unitär.

Wir interessieren uns zunächst für Symmetrien, die man

stetig mit der Identität verbinden kann (Rotationen, Translationen, ...).

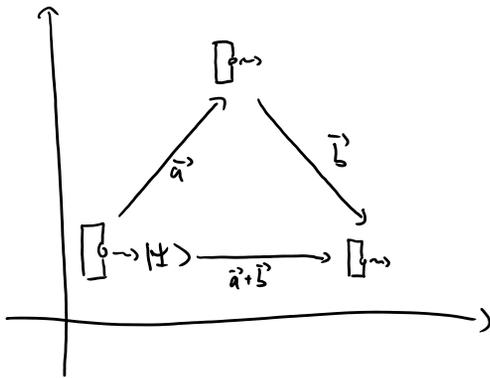
Diese Symmetrien führen zu unitären Operationen, da  $\mathbb{1}$  unitär ist, und man nicht stetig eine unitäre in eine anti-unitäre überführen kann:

$$U (i\mathbb{1}) U^{-1} = i\mathbb{1} \quad \forall \text{ unitären } U$$

$$U (i\mathbb{1}) U^{-1} = -i\mathbb{1} \quad \forall \text{ anti-unitären } U.$$

Für allgemeine Symm. können anti-unit. auftreten (Zeitumkehr...).

II Die nächste starke Bedingung erhalten wir, wenn wir die sukzessive Anwendung von zwei Symmetrioperationen betrachten:



Die Präp. unten rechts kann auf zwei Arten beschrieben werden:

$$T_{\vec{b}} T_{\vec{a}} |\psi\rangle, \quad \text{oder}$$

$$T_{\vec{a}+\vec{b}} |\psi\rangle$$

Beide müssen zu gleichen physikalischen

Vorhersagen führen. Das ist der Fall  $\Leftrightarrow$  die Wellenfkt. sich nur durch eine Phase unterscheiden, also:

$$T_{\vec{a}} T_{\vec{b}} = e^{i\lambda(\vec{a}, \vec{b})} T_{\vec{a}+\vec{b}}$$

für geeignete Fkt.  $\lambda(\vec{a}, \vec{b}) \in \mathbb{R}$ .

Operatoren  $T$ , die diese Relation erfüllen, nennt man eine *projektive Darstellung* der Symmetrie. (Wenn der Phasenfaktor immer = 1 ist, spricht man von einer *linearen Darstellung*, oder einfach nur von einer *Darstellung*).

Wir erhalten also eine notwendige Bedingung an die Wahl eines Hilbertraums für ein System: Auf dem Hilbertraum muss es Operatoren geben, die eine projektive Darstellung der Symmetriegruppe bilden! Wie wir sehen werden, schränken Bedingungen dieser Art die Wahl des

Hilbertraums (und der Observablen) sehr stark ein.

Tatsächlich hat man alle projektiven Darstellungen der physikalisch wichtigsten Symmetriegruppen (Galilei-Gruppe; ihr relativistisches Analogon, die Poincare-Gruppe; die Drehgruppe  $SO(3)$ , ...) charakterisiert. Das Verhalten eines Quantensystems unter diesen Symmetrien wird für so wichtig erachtet, dass man den Begriff "Teilchenart" oft mit "Darstellung der Symmetriegruppe" gleichsetzt. Dies wird in der relativistischen Quantenfeldtheorie genauer besprochen...

Für verschiedene Gruppen ist es unterschiedlich schwierig, alle projektiven Darstellungen zu finden. Der vielleicht leichteste Fall ist die Drehgruppe - wir werden die Theorie hier vollständig entwickeln. Für die relativistische Poincaregruppe ist es tatsächlich *leichter* als für die Galileigruppe - beide Fälle übersteigen aber den Rahmen dieser Vorlesung.

III Viele wichtige Symmetrien lassen sich stetig mit der Identität verbinden. In diesen Fällen kann man viel über die Struktur und Darstellungen lernen, wenn man sich auf "Elemente in der Nähe der  $\mathbb{1}$ " einschränkt (Lie-Theorie).  
Wir erklären das am Beispiel von Kontinuierlichen Matrixgruppen.

Bsp.:

$$\begin{aligned} SO(m) &= \{ \text{reelle } m \times m \text{ Matrizen } O \text{ mit } O^T O = \mathbb{1} \} \\ SU(m) &= \{ \text{komplexe } m \times m \text{ " } U \text{ mit } U^T U = \mathbb{1} \} \\ Sp(2m) &= \{ \text{reelle } 2m \times 2m \text{ " } S \text{ mit } S^T J S = \mathbb{1} \} \quad (TP1). \end{aligned}$$

Sei  $G$  eine solche Matrixgruppe.

### Lie-Gruppe - Lie-Algebra-Korrespondenz

- Gruppe  $\rightarrow$  Erzeugen Sei  $R(t)$  ein Pfad in  $G$  mit  $R(0) = \mathbb{1}$ .

Setze 
$$M = \left. \frac{\partial}{\partial t} R(t) \right|_{t=0} \quad \text{"Tangentenvektor bei } \mathbb{1}$$

Also: 
$$R(t) = \mathbb{1} + tM + O(t^2).$$



Man nennt  $M$  einen Erzeuger oder (weniger präzise, für "kleine"  $t$ ):  
 $\mathbb{1} + tM$  eine infinitesimale Transformation.

Man nennt  $\mathbb{1}$  einen Erzeuger oder (weniger präzise, für kleine  $t$ ):  
 $\mathbb{1} + tM$  eine infinitesimale Transformation.

• Erzeuger  $\rightarrow$  Gruppe

Satz: Sei  $M$  ein Erzeuger. Dann ist

$$R(t) := e^{tM} = \mathbb{1} + tM + \frac{t^2}{2}M^2 + \dots$$

ein Element der Gruppe.

• Alle Elemente  $R \in G$ , die "hinreichend nah" an  $\mathbb{1}$  liegen, entstehen eindeutig auf diese Art.

Eigenschaften der Menge  $\mathfrak{g}$  der Erzeuger von  $G$ :

①  $\mathfrak{g}$  ist ein Vektorraum

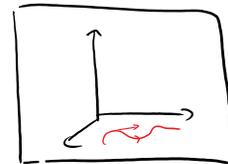
Bew.:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \exp(tM_1) \exp(tM_2) = M_1 + M_2.$$

②  $\mathfrak{g}$  ist abgeschlossen unter Kommutatoren. Also:  $M_1, M_2 \in \mathfrak{g} \Rightarrow [M_1, M_2] \in \mathfrak{g}$ .

Bew.: Setze  $R^{(s)}(t) := e^{sM_1} e^{tM_2} e^{-sM_1}$ .

$$\Rightarrow \forall s: \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_0 R^{(s)}(t) \in \mathfrak{g}.$$



Da  $\mathfrak{g}$  V.R. ist, liegen alle Tangenten an Pfade durch  $\mathfrak{g}$  im  $\mathfrak{g}$ .

$$\Rightarrow \mathfrak{g} \ni \left. \frac{\partial}{\partial s} \right|_0 \left[ \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_0 R^{(s)}(t) \right] = \left. \frac{\partial}{\partial s} \right|_0 e^{sM_1} M_2 e^{-sM_1} \stackrel{\uparrow}{=} [M_1, M_2].$$

(wie Heisenberg-Bild-Rechn.)  $\square$

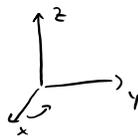
Bsp.:  $SO(3)$  ——— wichtig ——— wichtig ——— wichtig ———

$\left[ \begin{array}{c} \cos t \quad -\sin t \\ \dots \end{array} \right] \quad \uparrow^z$

DSP: SUI5/

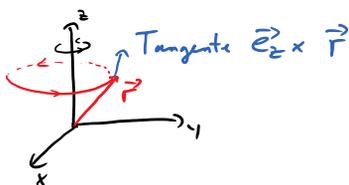
wichtig — wichtig — wichtig

$$R_{\vec{e}_z}(t) = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t & \\ \sin t & \cos t & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$



$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \Big|_0 R_{\vec{e}_z}(t) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & \\ 1 & 0 & \\ & & 0 \end{bmatrix} =: M_z$$

Geometrisch:  $\forall \vec{r} \in \mathbb{R}^3$  ist  $\frac{d}{dt} R_{\vec{e}_z}(t) \vec{r} = M_z \vec{r} = \vec{e}_z \times \vec{r}$ .



Vergl. "instantane Drehung" des starren Körpers im TPI.

Allgemein:  $R_{\vec{\omega}}(t)$  Drehung um Achse  $\vec{\omega}$  und Winkel  $t \|\vec{\omega}\|$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \Big|_0 R_{\vec{\omega}}(t) \vec{r} = \vec{\omega} \times \vec{r}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \Big|_0 R_{\vec{\omega}}(t) =: M_{\vec{\omega}} = \begin{bmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & \omega_x \\ -\omega_y & -\omega_x & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \underline{\mathfrak{so}(3)} = \{ \text{anti-symm. } 3 \times 3 \text{ Matrizen} \}$$

Basis:

$$M_x = \begin{bmatrix} 0 & & \\ & 0 & 1 \\ & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad M_y = \begin{bmatrix} 0 & & \\ & 0 & 1 \\ -1 & & 0 \end{bmatrix}, \quad M_z = \begin{bmatrix} 0 & -1 & \\ 1 & 0 & \\ & & 0 \end{bmatrix}.$$

Nach ② ist der Kommutator von Erzeugern wieder Erzeuger...

... aber was bedeutet  $[M_1, M_2]$ ?

Antwort Kommutator von Erzeugern  $\hat{=}$  Verknüpfung von Gruppenelementen.

(wichtig!!!)

Präzise macht dies die Baker-Campbell-Hausdorff Formel:

(aus Bonn, von Nazis in dem Selbstmord getrieben)

### B-C-H

$$\exp(A)\exp(B) = \exp\left(A+B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] + \dots\right)$$

weitere, geschichtete Kommutatoren.

Bew.: Allgemeine Aussage nicht trivial.

Die Terme niedriger Ordnung kann man bekommen, indem man  $A = t\tilde{A}$ ,  $B = t\tilde{B}$  setzt und beide Seiten in  $t$  Taylor-entwickelt...  $\square$

Bsp.: SO(3):

$$[M_x, M_y] = M_z$$

+ zyklische Vertauschungen

Lie-Algebra der Drehgruppe

IV

Zurück zum Ziel: Charakterisiere Darstellungen der Symmetriegruppen.

Da (nach BCH) die Gruppenstruktur durch die Kommutatorrelationen der Erzeuger bestimmt wird liegt nahe:

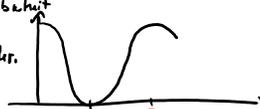
Darstellung  
von  $G$

$\Rightarrow$

( $\Leftarrow$ )

Fast. Unterschiede  
physik. interessant.

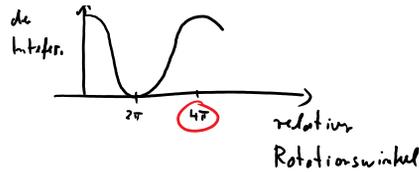
" Sichtbarkeit  
de Interf.



Darstellung  
von  $g$ .

$\rightarrow$  später

$\leftarrow$  oft leichter  
zu verstehen.



Dazu sei  $U: G \rightarrow U(\mathcal{X})$  unitäre Darstellung von  $G$ .

Also:

- $U(R) U(R)^{-1} = \mathbb{1}$
- $U(\mathbb{1}) = \mathbb{1}$
- $U(R) U(S) = U(RS)$  (projektive Version  $\rightarrow$  später).

Sei  $M = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 R(t)$  Erzeuger. Setze:

$$(*) \quad u(M) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 U(R(t))$$

Dann: ① (\*) definiert eine lineare Abb.:  $u(M_1 + cM_2) = u(M_1) + cu(M_2)$

②  $u$  erhält Kommutatorrelationen:

$$[u(M_1), u(M_2)] = u([M_1, M_2])$$

Bew.: ① Ketten- und Produktregel.....

$$\begin{aligned} ② \quad u([M_1, M_2]) &= u\left(\left. \frac{d}{ds} \right|_0 e^{sM_1} M_2 e^{-sM_1}\right) \\ &= \left. \frac{d}{ds} \right|_0 u\left(e^{sM_1} M_2 e^{-sM_1}\right) \\ &= \left. \frac{d}{ds} \right|_0 \left. \frac{d}{dt} \right|_0 U\left(e^{sM_1} e^{tM_2} e^{-sM_1}\right) \\ &= [u(M_1), u(M_2)]. \end{aligned}$$

□

Bsp.:  $\text{Spin}^{-\frac{1}{2}}$ . Setze  $M_i = -\frac{i}{2} \sigma_i$   $i \in \{x, y, z\}$   
 $\uparrow$   
 Pauli-Matrizen

$$\Rightarrow [M_x, M_y] = -\frac{1}{4} [\sigma_x, \sigma_y] = -\frac{i}{2} \sigma_z = M_z \quad + \text{zyklisch}$$

~ Die  $-\frac{i}{2} \sigma_k$  erfüllen die Vertauschungsrelationen der Drehgruppe.

Welche weiteren Darst. von  $\mathfrak{so}(3)$  gibt es, und wie passen die Paulimatrizen in das Schema? ~ nächstes Kapitel.

Ab hier ist Baustelle!

(Also, noch mehr als sonst).

Def.: Ein quantenmech. Drehimpuls ist Satz von hermiteschen Operatoren  $\{L_x, L_y, L_z\}$  mit

$$(*) \quad [L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad + \text{zyklische Vertauschungen.}$$

(\*)  $\Leftrightarrow$  Die Op.  $M_k = \frac{1}{i\hbar} L_k$  erfüllen die Kommut.-Relationen der Drehgruppe. (Grund für diese Normalisierungsconvention  $\rightarrow$  später).

Ziel: Beschreibe H.R.  $\mathcal{X}$  auf den die  $L_i$  wirken.

Dazu verwenden wir "algebraische Methode", wie beim hermo. Oszillator.

Ⓘ Definieren

$$L^2 := L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

"Quadrat des Drehimpulses"

" $L^2$ " kann man als einzelnes Symbol lesen, oder als inneres Produkt des "operatorwertigen Vektors"

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

mit sich selbst.

Beh.:  $L^2$  kommutiert mit allen Generatoren  $L_x, L_y, L_z$ .

Bew.: (leicht, aber nervig...)

Während rechts der langweilige Beweis gemacht wird: Ein Polynom in Elementen der Lie-Algebra, dass mit der gesamten Lie-Algebra vertauscht, heißt *Casimir-Operator*. Es gibt eine Konstruktion, die für beliebige Lie-Algebren einen quadratischen Casimir-Operator liefert. Der allgemeine Beweis, dass der so definiert Operator tatsächlich mit allen Elementen kommutiert ist nicht schwieriger - und sicher informativer - als die nervige Rechnung auf der rechten Seite. Man muss dafür aber kurz über Begriffe wie "Tensoralgebra" und "universelle einhüllende Algebra" nachdenken. Für die VL ist das zu abstrakt. Mathematisch interessierten Studierende empfehle ich aber, das nachzulesen

$\rightarrow$  Übung

einhüllende Algebra" nachdenken. Für die VL ist das zu abstrakt. Mathematisch interessierten Studierende empfehle ich aber, das nachzulesen.



□

# Symmetrien 2: Projektive Darstellungen und kanonische Vertauschungsrelationen

Friday, May 17, 2019 12:11 PM

# Produkträume und Kopplung von Drehimpulsen

Friday, May 17, 2019 12:12 PM

# Das Wasserstoffatom

Friday, May 17, 2019 12:12 PM

# Störtheorie

Friday, May 17, 2019 12:12 PM

# Verschränkung, Dekohärenz, Bell-Ungleichungen

Friday, May 17, 2019 12:13 PM