

Table of Contents

- [Inhaltsverzeichnis](#)
- [Motivation ^ J Modellsysteme](#)
 - [1.1 Quantenmechanik](#)
 - [1.2 Das Stern-Gerlach Experiment: Scheinbarer Widerspruch zur Rotationsinvarianz](#)
 - [1.2.1 Stern-Gerlach: magnetisches Moment entlang verschiedener Achsen](#)
 - [1.2.2 Stern-Gerlach: Quantenmechanische Beschreibung](#)
 - [1.3 Teilchen in der Falle](#)
 - [1.3.1 Teilchen in Falle: QM Beschreibung](#)
- [Wahrscheinlichkeitstheorie](#)
 - [2.1 Wahrscheinlichkeitstheorie](#)
 - [2.2 Interpretation von Wahrscheinlichkeiten](#)
 - [2.3 Zufallsvariablen](#)
 - [2.4 Statistik](#)
 - [2.5 Zusammenfassung](#)
- [Hilberträume](#)
 - [3.1 Hilberträume](#)
 - [3.1.1 Anmerkungen zu Funktionenräumen](#)
 - [3.2 Lineare Operatoren](#)
 - [3.3 Dirac-Notation](#)
 - [3.3a Dirac-Notation: Fragen und Antworten](#)
 - [3.4 Basen und Matrixdarstellungen](#)
 - [3.5 Adjungierte Operatoren](#)
 - [3.6 Spektraldarstellung](#)
 - [3.6.1 Funktionen von Operatoren](#)
 - [3.6.2 Spektren im \$\infty\$ -dimensionalen: Das Problem](#)
 - [3.6.3 Spektren im \$\infty\$ -dimensionalen](#)
 - [3.6.4 Bsp.: Ableitungen und Translationen](#)
 - [3.7 Unitäre Operatoren](#)
 - [3.8 Projektoren](#)
 - [3.9 Verschiedenes](#)
 - [3.9.1 Die Spur](#)
 - [3.9.2 Entartung](#)
 - [3.9.3 Kommutierende Operatoren](#)
- [Spin 1/2-Systeme](#)
 - [4.1 Postulate der QM \[diskrete projektive Messungen, reine Zustände\]](#)
 - [4.2 Zustände und Observablen](#)
 - [4.3 Hilbertraum und Observablen aus Symmetrien](#)
 - [4.3.1 Symmetrien und Satz von Wigner](#)
 - [4.3.2 Symmetriegruppen und Darstellungen](#)
 - [4.3.3 Erzeugende](#)
 - [4.3.4 Erzeugende der Drehgruppe](#)
 - [4.3.5 Baker-Campbell-Hausdorff](#)
 - [4.3.6 Darstellungen der Erzeugenden](#)
 - [4.3.7 Observablen für Spin-1/2-Systeme](#)

- [4.4 Postulate: Zeitentwicklung \[Hamiltonsch\]](#)
 - [4.4.1 Zeitentwicklungsoperator und stationäre Schrödingergleichung](#)
 - [4.4.2 Bsp.: Lamorpräzession](#)
 - [4.4.3 Das Heisenberg-Bild](#)

- [QM von Teilchen im \$\mathbb{R}^n\$](#)
 - [5.1 Kanonische Quantisierung von Teilchen im \$\mathbb{R}^N\$](#)
 - [5.2 Postulate der QM \[allgemeine projektive Messungen, reine Zustände\]](#)
 - [5.3 Ausblick: Kanonische Quantisierung aus Symmetrien](#)
 - [5.4 Die Heisenbergsche Unschärferelation](#)
 - [5.5 Eindimensionale Potentialprobleme](#)
 - [5.5.1 Freie Teilchen](#)
 - [5.5.2 Die Potentialstufe](#)
 - [5.5.3 Das Kastenpotential](#)
 - [5.5.4 Streutheorie in einer Dimension](#)
 - [5.5.5 Satz von Ehrenfest](#)

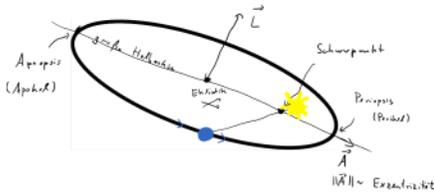
- [Der harmonische Oszillator](#)
 - [6.1 Der harmonische Oszillator](#)
 - [6.2 Algebraische Lösung](#)
 - [6.2.1 Erzeuger, Vernichter, Besetzungszahloperator](#)
 - [6.2.2 Eigenwerte des Besetzungszahloperators durch Leitern](#)
 - [6.2.3 Keine Entartung](#)
 - [6.2.4 Eigenbasis des 1-D Oszillators](#)
 - [6.2.5 Erwartungswerte in Eigenzuständen](#)
 - [6.2.6 Ortsdarstellung](#)
 - [6.2.7 Zusammenfassung](#)
 - [6.3 Kohärente Zustände](#)
 - [6.4 Mehrdimensionale Oszillatoren](#)
 - [6.5 Ausblick: Gekoppelte Oszillatoren](#)

- [Drehimpuls](#)
 - [7.1 Drehimpuls: Wiederholung der Hintergründe](#)
 - [7.2 Drehimpulsoperatoren](#)
 - [7.2.1 Magnetische und Drehimpulsquantenzahl](#)
 - [7.2.2 Magnetische QZ durch Leitern](#)
 - [7.2.3 Drehimpulsquantenzahl](#)
 - [7.2.4 Beispiel: Spin-1/2-Darstellung](#)
 - [7.3 Bahndrehimpuls](#)
 - [7.3.1 Reduktion auf Funktionen auf der Sphäre](#)
 - [7.3.3 Kugelflächenfunktionen](#)
 - [7.4 Kopplung von Drehimpulsen](#)
 - [7.4.1 Mehrteilchensysteme](#)
 - [7.4.2 Lokale Operatoren](#)
 - [7.4.3 Gesamtdrehimpuls](#)
 - [7.4.4 Clebsch-Gordan-Zerlegung](#)

- [Bellsche Ungleichungen](#)
 - [8.1 Verschränkte Zustände](#)
 - [8.2 Die Socken des Reinhard Bertlmann](#)
 - [8.3 Bell-Ungleichungen: Übersicht](#)
 - [8.3.1 Epistemische Selbstverteidigung](#)
 - [8.3.2 Das CHSH-Szenario](#)
 - [8.3.3 Die CHSH-Ungleichung](#)
 - [8.3.4 Schlupflöcher](#)
 - [8.4 Verletzungen von CHSH in der QM](#)

- [8.5 Unmögliche Maschinen](#)
- **[Zentralpotentiale](#)**
 - [9.1 Zentralpotentiale](#)
 - [9.2 Analytischer Ansatz](#)
 - [9.2.1 Drehimpulserhaltung](#)
 - [9.2.2 Reduktion auf eindimensionales Potentialproblem](#)
 - [9.2.3 Einschränkung auf \$1/r\$ -Potential; Wechsel zu angepassten Einheiten](#)
 - [9.2.4 Abspaltung des asymptotischen Terms](#)
 - [9.2.5 Lösung durch Potenzreihenansatz](#)
 - [9.2.6 Diskussion der Lösungen](#)
 - [9.3 Algebraischer Ansatz](#)
 - [9.4 Geometrischer Ansatz](#)
- **[Störtheorie](#)**
 - [10.1 Störtheorie](#)
 - [10.2 Zerlegung des Hamiltonoperators](#)
 - [10.3 Potenzreihenansatz \(Rayleigh-Schrödinger\)](#)
 - [10.4 Energiekorrektur zur ersten Ordnung](#)
 - [10.5 Beispiel: Anharmonischer Oszillator](#)
 - [10.6 Eigenvektoren: Korrektur erster Ordnung](#)
 - [10.7 Energiekorrektur zweiter Ordnung](#)
 - [10.8 Beispiel: Linear gestörter harmonischer Oszillator](#)
 - [10.9 Störung eines entarteten Eigenwerts](#)
 - [10.10 Beispiel](#)
- **[Onlinesitzungen](#)**
 - [1. Online-Sitzung, 15.4.2021](#)
 - [2. Online-Sitzung](#)
 - [Untitled page](#)
 - [Krypto](#)

1.1 Quantenmechanik



Seit Newton:

- Klassische Mechanik beschreibt Planeten und Geschosse...
- ...aber nicht Stabilität von Materie, diskrete Spektrallinien, uvm.

Seit dem frühen 20. Jahrhundert:

- Quantenmechanik bietet völlig neuen mathematischen Rahmen.
- Formalismus funktioniert perfekt: Keine Widersprüche zu Experimenten bekannt!
- Die Interpretation des Formalismus sorgt bis heute für Debatten!



Mechanistisches Weltbild:

- Newton beschreibt Natur als Massenpunkte, mit wohldefinierten Orten und Geschwindigkeiten.
- Warum funktioniert das so gut? Vielleicht weil **die Welt so ist**.

Quantenmechanik rüttelt daran:

- 1920er: QM weist Teilchen keinen definitiven Ort und Impuls zu. Ist die Theorie daher unvollständig?
- 1960er: John Bell zeigt, dass man experimentell entscheiden kann, ob eine "vollständige" Beschreibung möglich ist.
- 1980er: Experimente können durchgeführt werden. Es sieht nicht gut aus für das mechanistische Weltbild. Alternativen bleiben umstritten.
- 2000er: Rechnen statt Rotwein! Die Quanteninformation fragt, wie man unintuitive Eigenschaften zur Informationsverarbeitung nutzen kann.

EINSTEIN ATTACKS QUANTUM THEORY

Scientist and Two Colleagues Find It Is Not 'Complete' Even Though 'Correct.'

SEE FULLER ONE POSSIBLE

Believe a Whole Description of 'the Physical Reality' Can Be Provided Eventually.

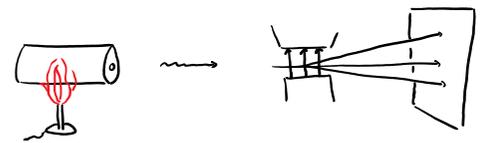


- 1980er: Experimente können durchgeführt werden. Es sieht nicht gut aus für das mechanistische Weltbild. Alternativen bleiben umstritten.
- 2000er: Rechnen statt Rotwein! Die Quanteninformation fragt, wie man unintuitive Eigenschaften zur Informationsverarbeitung nutzen kann.



Plan:

- Einfache Modellsysteme als "Einladung zur QM".
- Mathematisches Handwerkszeug:
 - Wahrscheinlichkeitstheorie
 - Hilberträume



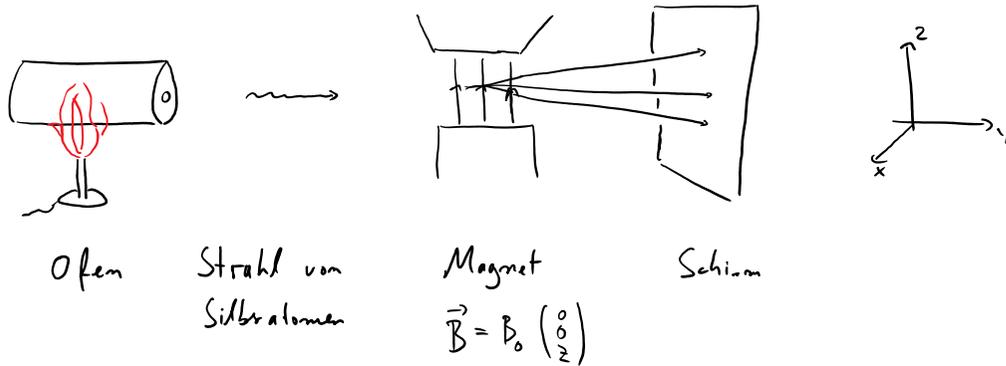
1.2 Das Stern-Gerlach Experiment:
Scheinbarer Widerspruch zur
Rotationsinvarianz



Das Stern-Gerlach-Exp. (Frankfurt 1922)

misst das magnetische Moment

von Atomen:



Was erwarten wir?

Energie eines Teilchens mit magnetischen Moment \vec{m} : $E = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -m_z B_0 z$.

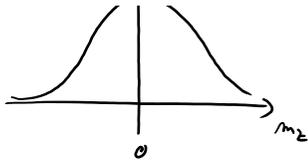
⇒ Kraft: $\vec{F} = -\vec{\nabla} E = m_z B_0 \vec{e}_z$

⇒ Ablenkung proportional zu z-Komponente des magn. Moments.

Beh.: Aus Rotationsinvarianz folgt für Verteilung von m_z (qualitativ):



- Maximaler Wert wird bei $m_z = 0$ angenommen,



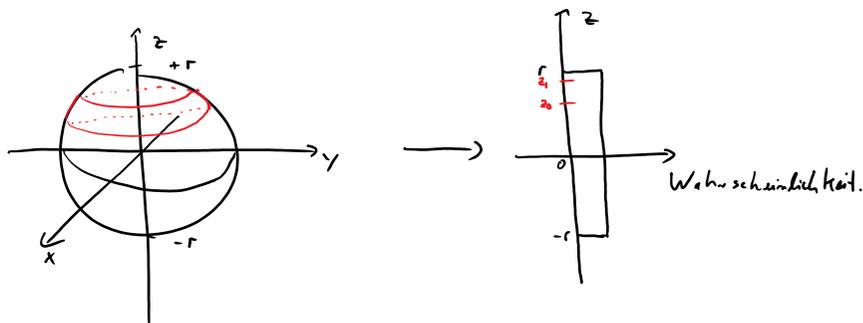
angenommen,

- In Richtung der Ränder fällt die Verteilung monoton ab.

optional

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

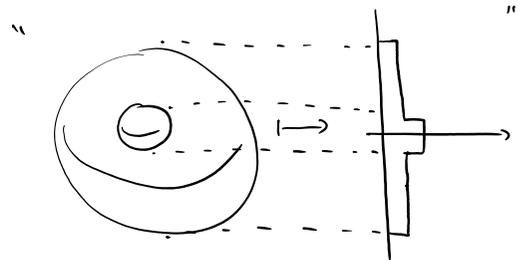
- ② Ziehe Punkt zufällig von 2-Sphäre mit Radius r .
 \Rightarrow die z -Komponente ist zwischen $-r$ und r gleichverteilt.



Bew.:
$$Pr[z \in [z_0, z_1]] = \frac{1}{4\pi r^2} \int_{\sigma=\cos^{-1}z_0}^{\cos^{-1}z_1} d\sigma \int_0^{2\pi} r \sin\sigma d\phi = \frac{1}{2r} (z_1 - z_0) \quad \square$$

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

\nearrow Wahrscheinlichkeitsdichte der z -Komponente \uparrow Wahr.-dichte des Drehimpulsbetrags.

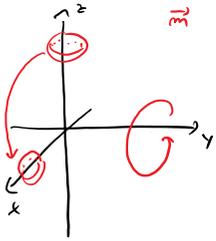


\Rightarrow von 0 monoton fallend.

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.

Vereinfacht: Kein Minimum bei $m_z = 0$:

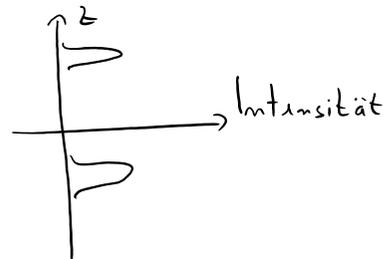
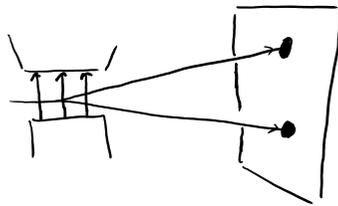
Ofen ist symmetrisch unter Drehung um y -Achse.



\Rightarrow Verteilung von \vec{m} sollte invariant sein, unter Drehung um y -Achse.
Aber so kann immer $m_z = 0$ erreicht werden.

Beobachtet wird:

①



Beobachtet werden:

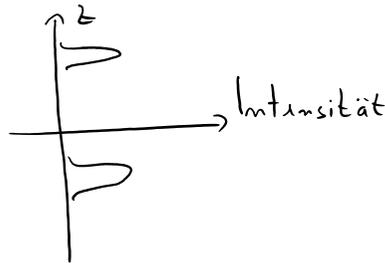
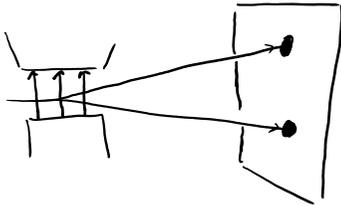
Zwei Maxima; Intensität um $m_z = 0$ ist 0.

Die Beobachtungen von Stern-Gerlach widersprechen also nicht nur *einer spezifischen* klassischen Theorie von Silberatomen im Ofen, sondern sind inkompatibel mit *allen* an die Symmetrie angepassten klassischen Erklärungen! Auch dies deutet also auf die Notwendigkeit hin, eine fundamental neue Theorie zu finden.

1.2.1 Stern-Gerlach: magnetisches Moment entlang verschiedener Achsen

Beobachtet wird:

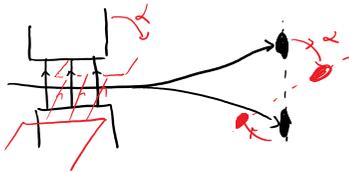
①



Interessant. Machen wir weitere Experimente:

②

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



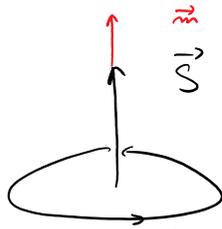
... die Punkte drehen sich mit, die Verteilung ändert sich nicht.

③

Exp. ① zeigt, dass die z-Komponente zwei Zustände annehmen kann. Nennen wir sie "spin-up" \uparrow , "spin-down" \downarrow .

Sprechweise: Spin

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



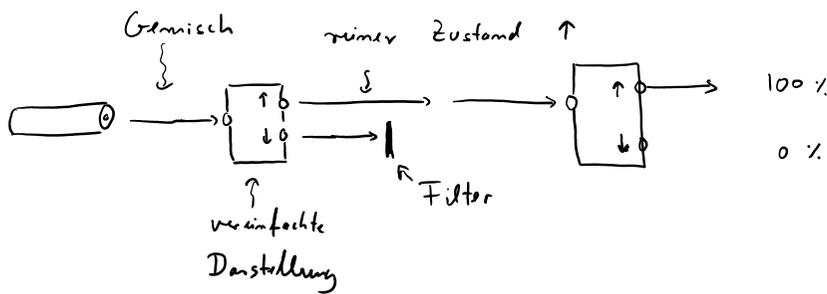
. Verhältnis γ

Drehmoment \vec{S} .



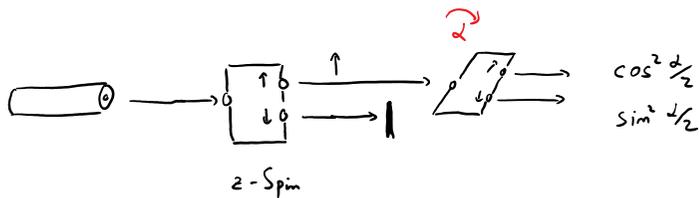
→ Sprechweise: Mom misst "Spin".

(III a) Experimentieren wir mal nur mit der ↑-Sorte:



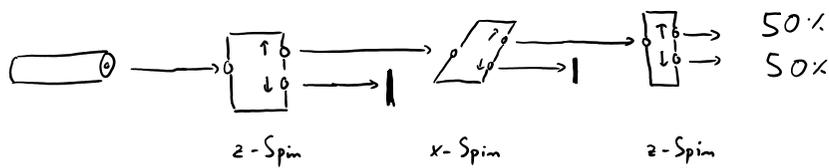
Wiederholt man die Spin-Messung im z-Richtung am gefilterten Strahl, nehmen alle Atome den ↑-Ausgang. Die Eigenschaft "z-Spin ↑" ist also "stabil".

(III b)



Verdreht man die 2. Messung um den Winkel α 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 α durch $\frac{\pi}{2}$ 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 klappt 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.

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.

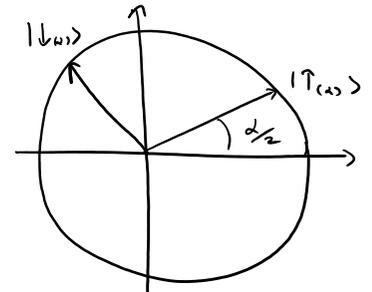
Die Quantenmechanik ordnet den Komponenten der beschriebenen Experimente mathematische Objekte zu, und sagt, wie diese kombiniert werden müssen, um Wahrscheinlichkeiten zu berechnen.

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

1.2.2 Stern-Gerlach:
Quantenmechanische Beschreibung

Definiere zwei Vektoren:

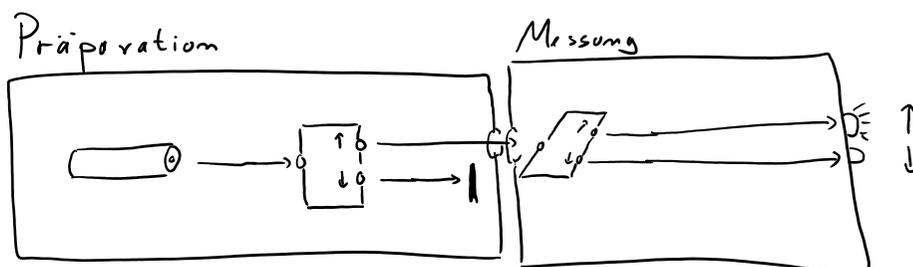
$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} = |\uparrow_{(\alpha)}\rangle, \quad \begin{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \\ -\cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} = |\downarrow_{(\alpha)}\rangle$$



Die lustigen Klammern "1.3" heißen Kets. Für's Erste ist das nur Notation.

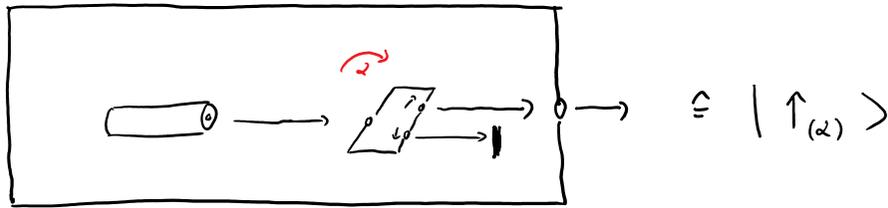
Die Vektoren definieren eine ONB für \mathbb{C}^2 .

Die Verbindung zwischen Vektoren und Physik geht so:



① Präparation

I Präparation



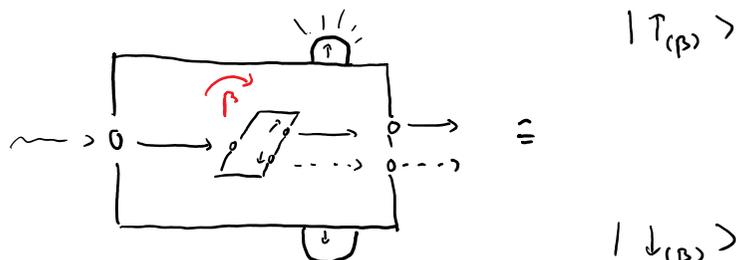
Wir drehen die Magneten um den Winkel α - also so, dass das \vec{B} -Feld parallel zu $\begin{pmatrix} \sin \alpha \\ 0 \\ \cos \alpha \end{pmatrix}$ ausgerichtet ist - und selektieren Atome, die entlang dieses Vektors abgelenkt werden (anstatt in die Gegenrichtung).

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





$|\downarrow_{(\beta)}\rangle$

Um den Zustand der Atome zu messen, betrachten wir folgenden Aufbau: Ein eingehendes Atom wird durch ein um β 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 $|\uparrow_{(\alpha)}\rangle / |\downarrow_{(\alpha)}\rangle$ mit den beiden Ausgängen.

Die QM postuliert folgende Regeln ("Bornsche Regel")

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

• das Ergebnis \uparrow mit Wahrscheinlichkeit

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

- das Ergebnis d mit w .

$$|\langle \uparrow_\alpha | \downarrow_\beta \rangle|^2 = \dots = \sin^2\left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)$$

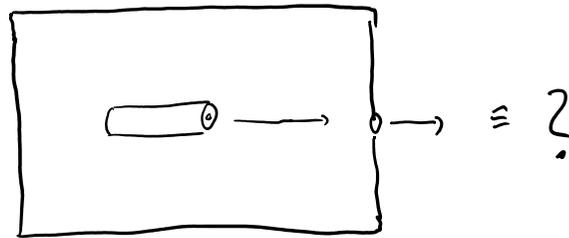
(2) Direkt nach der Messung ist das Atom im Zst.

$|\uparrow_{(p)}\rangle$ oder $|\downarrow_{(p)}\rangle$ - je nach Messausgang.

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

→ Präsenz.

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



noch nicht formalisiert haben. (Der Zst. wird nicht durch eine Wellenfkt. sondern durch eine Dichtematrix beschrieben. → später).

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, die sich als nicht richtig oder allgemein genug herausgestellt haben.

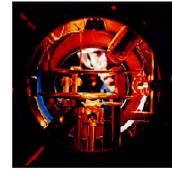
Es gibt ein recht aktives Forschungsprogramm mit dem Ziel, die Struktur der QM eindeutig aus "plausiblen" physikalischen Annahmen abzuleiten - so wie z.B. die Struktur der speziellen Relativitätstheorie aus der Beobachtung folgt, dass die Lichtgeschwindigkeit in jedem Bezugssystem konstant ist. Der Erfolg ist gemischt:

- Die Tatsache, dass Wahrscheinlichkeiten aus inneren Produkten in komplexen Vektorräumen kommen, werden wir hier als gegeben annehmen
- Die Dimension, die Form der Vektoren, und später die damit verbundenen Operatoren können aber weitgehend aus Symmetrieüberlegungen abgeleitet werden.

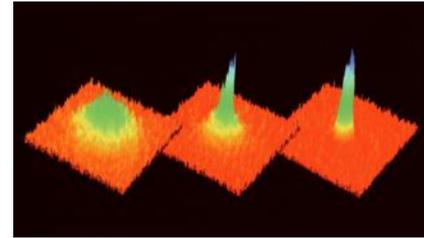
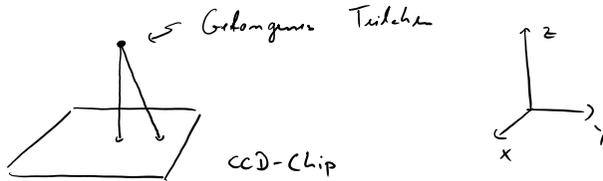
1.3 Teilchen in der Falle

Experiment:

- Fange Teilchen in Falle
- Kühle so weit wie möglich ab
- Schalte Falle ab, messe Ankunft auf CCD-Chip unter der Falle



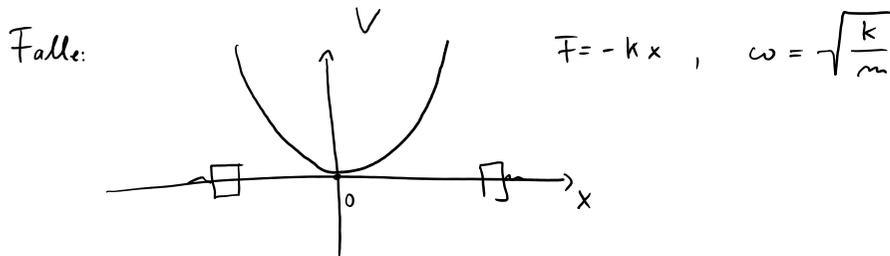
[nobelprize.org]



[William Phillips]

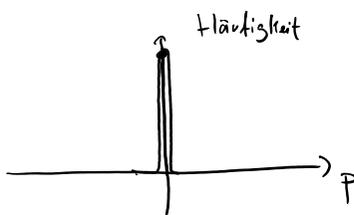
→ Misst Verteilung von x- und y-Komponenten des Impuls.

Leichteres Modell in 1-D

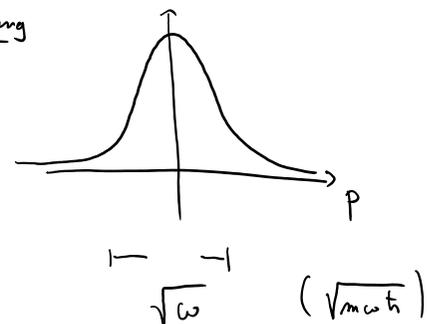


Messung:

Erwartet



Beobachtung



1.3.1 Teilchen in Falle: QM
Beschreibung

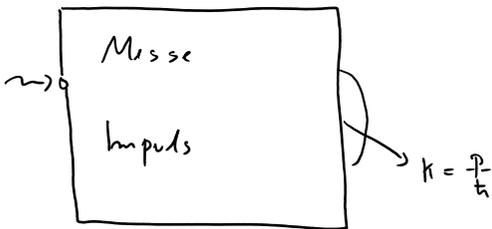
Vektorraum

Stem-Gerlach:	Teilchen im 1-D
Vektoren: $\in \mathbb{C}^2$	Vektoren: komplexwertige Fkt. auf \mathbb{R} .
Inneres Produkt: $(v, w) = \sum_{i=1}^2 \bar{v}_i w_i$	Inneres Produkt: $(\phi, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \bar{\phi}(x) \psi(x) dx$

Vektoren für Präparation und Messausgänge:



$$\underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4}}_c e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} = |\phi_0\rangle$$



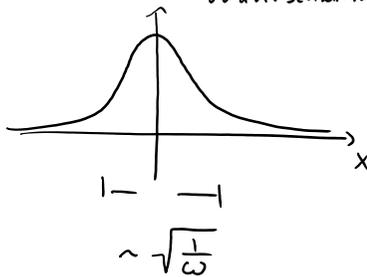
$$(2\pi)^{-1/2} e^{ikx} = |k\rangle$$



$$\delta_x(\cdot) = |x\rangle$$

Bornsche Regel

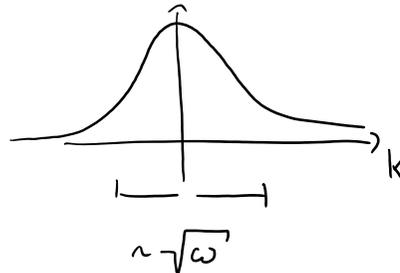
Ort Wahrscheinlichkeitsdichte = $|\langle x | \phi_0 \rangle|^2 = \left| c \int \delta_x(x') e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x'^2} dx' \right|^2$



$\sim \sqrt{\frac{1}{\omega}}$

$= c^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2}$

Impuls



$|\langle k | \phi_0 \rangle|^2 = \left| c (2\pi)^{-1/2} \int e^{-ikx} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} dx \right|^2$

$= \left| c \tilde{\mathcal{F}}[\phi_0](k) \right|^2$

$= \tilde{c} e^{-\frac{\hbar}{2m\omega} k^2}$

In der klassischen Mechanik sind Ort und Impuls zwei unabhängige Variablen. Wir sehen, dass in der QM beide Größen aus dem gleichen Objekt (dem Zustandsvektor $|\phi_0\rangle$) abgeleitet werden. Dies ist z.B. der mathematische Ausgangspunkt der Unschärferelation.

2.1 Wahrscheinlichkeitstheorie

Wir erinnern uns an die Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie.

Die Ergebnismenge Ω ist Menge aller Werte, die ein zufälliger Prozess prinzipiell annehmen kann.

Bsp.: • Würfel: $\Omega = \{1, \dots, 6\}$.

• Anfangsbed. für klass. mechanisches System mit N FHG:

$$\Omega = \mathbb{R}^{2N} \quad (\text{Phasenraum mit } N \text{ Orten und } N \text{ Impulsen}).$$

Als nächstes müssen wir eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Ω angeben. Das geht auf verschiedene Arten. Z.B. durch ein Maß:

Ein Wahrscheinlichkeitsmaß P_r ordnet jeder Teilmenge $A \subset \Omega$ eine Zahl $P_r(A) \in [0, 1]$ zu ("Wahrsch., dass Prozess einem Wert aus A annimmt").

Bsp.: Für $\Omega = \{1, \dots, 6\}$

{	① Fairer Würfel: $P_r(A) = \frac{ A }{6}$.
	② Gezinkter Würfel: $P_r(A) = \begin{cases} 1 & 6 \in A \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$.

Für $\Omega = \mathbb{R}^{2N}$

{	③ Teilchen, das im Ursprung ruht: $P_r(A) = \begin{cases} 1 & 0 \in A \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$
	④ Gauß-Maß um 0: $P_r(A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{2N}} \int_A e^{-\frac{1}{2} \ \vec{x}\ ^2} d^{2N} \vec{x}$.

Statt mit dem Maß $P_r(\cdot)$ arbeitet man häufig mit Wahrscheinlichkeitsdichten $p: \Omega \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$. Das geht so:

- Kontinuierlicher Fall, 1-D: $\Omega = \mathbb{R}$.

Maß, gegeben Dichte:
$$P_r(A) = \int_A p(x) dx.$$

Dichte, gegeben Maß: ① Def. Kumulierte Verteilung.

$$F(x) = P_r[(-\infty, x]]$$

= Wahrsch. dass Resultat $\leq x$ ist.

② $p(x) = \frac{d}{dx} F(x).$

- Kontinuierlicher Fall, höhere Dimensionen: $\Omega = \mathbb{R}^m$.

Maß, gegeben Dichte:
$$P_r(A) = \int_A p(\vec{x}) d^m \vec{x}.$$
 ← Bsp.: $p(\vec{x}) = \delta_0(\vec{x})$

Dichte, gegeben Maß: ① Def. Kumulierte Verteilung.

$$F(\vec{x}) = P_r[(-\infty, x_1] \times \dots \times (-\infty, x_m)]$$

= Wahrsch. dass 1. Komponente $\leq x_1$ und
2. " $\leq x_2$ und ...

② $p(\vec{x}) = \frac{\partial^m}{\partial x_1 \dots \partial x_m} F(x_1, \dots, x_m).$

- Diskreter Fall: $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots\}$

Maß, gegeben Dichte:
$$P_r(A) = \sum_{\omega \in A} p(\omega)$$

Dichte, gegeben Maß:
$$p(\omega) = P_r(\{\omega\}).$$

Bsp.: Für die Maße ① - ④

[Inverted classroom]

Anmerkungen

- Um diskreten und kont. Fall zu vereinheitlichen, schreibt man auch:

$$P_{\Gamma}(A) = \sum_{\omega \in A} p(\omega) =: \int_A p(\omega) d\omega \quad (\text{und nennt } d\omega \text{ das } \underline{\text{Zählmaß}})$$

oder

$$P_{\Gamma}(A) = \int_A p$$

(in der Physik-Literatur - nie in der Mathe).

- [Beliebter Fehler] Dichten sind keine Wahrscheinlichkeiten! Insbesondere können Dichten Werte größer als 1 annehmen (Echt jetzt? Gibt es da Einschränkungen?). Dichten sind koordinatenabhängig (wie transformieren sie sich?) - im Gegensatz zu Wahrscheinlichkeiten (Warum? Was ist mit der kumulierten Verteilung?).

[Inverted classroom]

2.2 Interpretation von Wahrscheinlichkeiten

Wahrscheinlichkeitstheorie studiert die Eigenschaften von Wahrscheinlichkeitsmaßen unabhängig von Anwendungen oder Interpretationen.

Es gibt eine [lange und kontroverse Debatte](#) darüber, wie mathematische Wahrscheinlichkeiten "richtig" zu interpretieren sind. Wir gehen das Thema pragmatisch an: Der mathematische Formalismus passt auf verschiedene Anwendungen, die jeweils ihre Berechtigung haben. "Richtig" vs "falsch" ist dabei kein hilfreicher Rahmen - stattdessen sollte man für jedes gegebene Problem fragen, wie *nützlich* die verschiedenen Interpretationen jeweils sind.

Zuvor ein paar Beispiele von Aussagen, denen man vielleicht Wahrscheinlichkeiten zuordnen möchte:

1. ...dass ein bestimmter Würfel sechs Augen zeigt,
2. ...dass man morgen die Liebe seines Lebens trifft,
3. ...dass es außerirdisches Leben gibt,
4. ...dass innerhalb der nächsten 10 Jahre das World Trade Center durch einen terroristischen Anschlag zerstört wird [bei Abschluss eines Versicherungsvertrags im August 2001],
5. ...dass eine zufällige natürliche Zahl eine Primzahl ist.

Zwei wichtige Interpretationen:

1. Bayessche Wahrscheinlichkeiten

In der Bayesschen Interpretation beschreiben Wahrscheinlichkeiten einen *subjektiven Grad von Sicherheit* über die Wahrheit einer Aussage.

Vorteil: Die Interpretation ist sehr allgemein anwendbar - insbesondere können Sie, wenn Sie wollen, jedem der fünf Beispiele oben eine Bayessche Wahrscheinlichkeit zuordnen.

Nachteil: In den Naturwissenschaften streben wir objektive Aussagen an. Insbesondere müssen Aussagen experimentell falsifizierbar sein und physikalische Eigenschaften sollen sich auf Elemente der Wirklichkeit und nicht auf Beobachter beziehen.

2. Die operationelle Interpretation

Wahrscheinlichkeiten assoziiert man hier mit *Anleitungen für wiederholbare Zufallsexperimente*. Zum Beispiel "werfe den Würfel hoch in die Luft und lese die Augenzahl ab". Die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses ist dann gleich dem Bruchteil der Male die das Ereignis auftritt, im Limes unendlich vieler Wiederholungen.

Vorteil: Operationelle Wahrscheinlichkeitsaussagen sind falsifizierbar (oder?) und Eigenschaften von Prozessen, nicht von Beobachtern.

Nachteile:

- Der Anwendungsbereich ist viel enger als im Bayesschen Formalismus. Betrachten Sie z.B. Aussage 3, über die Existenz von Außerirdischen. Das Experiment "Erschaffe ein Universum, lasse es sich für 20 Mrd. Jahren entwickeln, und schaue ob auf mehr als zwei Planeten

Lebensformen entstanden sind" ist, ähem, nicht beliebig oft durchführbar.

- Es ist unklar, wie präzise eine Anleitung sein muss. *Wie hoch muss der Würfel geworfen werden? Zählt "Kippe"? Wurf per Robotorarm? In welchem Schwerfeld?*

Diese Einwände sollte man zwar im Hinterkopf behalten - beunruhigend sind sie aber nicht. Der Zusammenhang zwischen mathematischen Modellen und physikalischer Wirklichkeit [ist nie exakt](#).

Beispiel: Die [traditionelle Definition des Amperes](#) ist geradezu lachhaft idealisiert - die Entwicklung der Elektrotechnik hat das aber nicht merklich gebremst.

- Der Limes "unendlich vieler Wiederholungen" ist problematisch. Im Sinne der Diskussion zuvor ist das in der Praxis kein Problem: Die empirisch beobachtete Frequenz von "sechs Augen", z.B., stabilisiert sich nach vielen Würfeln und weitere Wiederholungen bringen nur noch wenig zusätzliche Information (quantitativ beschreibt das die [Statistik](#)). Konzeptionell gibt es hier schon eher eine Schwierigkeit: Große Abweichungen nach vielen Wiederholungen sind möglich, aber sehr *unwahrscheinlich*. Haben wir nun eine *selbstbezügliche* Definition gegeben, die den Begriff der Wahrscheinlichkeit als Teil seiner eigenen Definition bereits voraussetzt?

Für die QM passt die operationelle Interpretation - trotz der genannten Nachteile - am Besten. Wir werden sie von nun an verwenden.

[Inverted Classroom]: Diskutiere die Einwände, die Praxis in der Physik, und bewerte Beispiele 1 - 5 durch den Blickwinkel der beiden Interpretationen.

Weitere Anmerkungen:

- Der Begriff *operationelle Interpretation* ist in der Literatur zur Grundlagen der Quantenmechanik üblich. (*Operationell* heißt hier "durch konkrete Handlungsanweisungen beschrieben". Also "Nimm die Münze! Werfe sie! 1000 Mal! Berechne die relativen Häufigkeiten!"). In der Kategorisierung [dieses philosophischen Artikels](#) wird sie als *Propensitätsinterpretation* beschrieben.
- Der Begriff der Propensitätsinterpretation geht auf Karl Popper zurück (vergl. Sein Kapitel im Sammelband *Quantum Theory and Reality*, ab Seite 31). Poppers Arbeiten waren motiviert durch Schwierigkeiten, die bei der Interpretation von Wahrscheinlichkeiten in der Quantenmechanik auftraten. Interessanterweise scheint es seine Absicht gewesen zu sein, eine *realistische* Interpretation der QM zu erreichen - ein Ziel, das aufgrund der Resultate von Bell heute gemeinhin als unerreichbar gilt (besprechen wir später). (Aus diesem Grund habe ich auf seinen Artikel "ab Seite 31" verwiesen. Dort finden Sie seine sehr klaren Ausführung zum Thema Wahrscheinlichkeit. Davor stehen seine unhaltbaren Spekulationen zur Quantenmechanik. Sir Karl kochte also nur mit Wasser).

2.3 Zufallsvariablen

Eine (reelle) Zufallsvariable ist eine Funktion $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Bsp.: • (Würfel): $\Omega = \{1, \dots, 6\}$, $X(\omega) = (-1)^\omega$

• (Mechanik): $\Omega = \mathbb{R}^{2N}$, $X(\vec{q}, \vec{p}) = H(\vec{q}, \vec{p}) / L_z(\vec{q}, \vec{p}) / p_i, \dots$

Die Verteilung der Werte von X ergibt sich so: Für $A \subset \mathbb{R}$ ist

$$P_{r_X}(A) = P_r(X^{-1}(A)) = \int_{\{\omega \mid X(\omega) \in A\}} p(\omega) d\omega.$$

Die Verteilung einer Zufallsvariablen kann sehr kompliziert sein. Wenige Kenngrößen enthalten aber oft bereits die wichtigsten Informationen. Insbesondere sind dies:

Erwartungswert

$$IE(X) := \int_{\Omega} X(\omega) dp(\omega)$$

Interpretation ["[Gesetz der großen Zahlen](#)"]: Wenn man ein Zufallsexperiment oft wiederholt, dann tendiert der Mittelwert der Ergebnisse gegen den Erwartungswert.

(Haben Sie den Unterschied zwischen *Erwartungswert* und *Mittelwert* verstanden?)

Varianz

$$\begin{aligned} \text{Var}(X) &:= \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2) \\ &= \mathbb{E}(X^2 - 2\mathbb{E}(X) \cdot X + \mathbb{E}(X)^2) \\ &= \mathbb{E}(X^2) - \mathbb{E}(X)^2 \end{aligned}$$

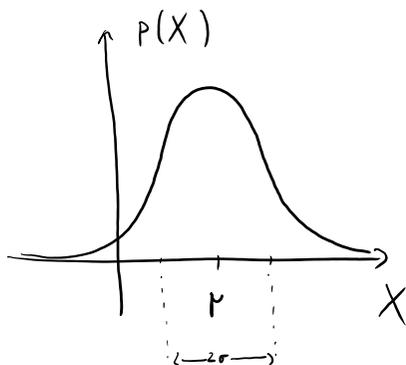
Standardabweichung

$$= \sqrt{\text{Var}(X)}$$

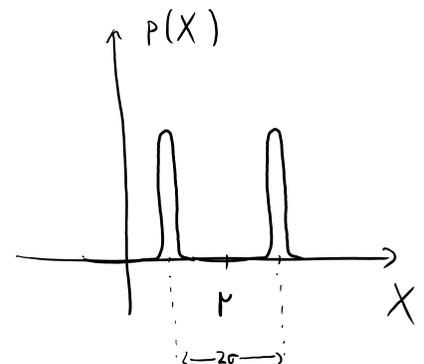
Interpretation: Die Varianz ist ein Maß der "Streuung" der Verteilung um den Mittelwert. Insbesondere verschwindet die Varianz einer Zufallsvariable X genau dann, wenn es einen Wert x gibt, der mit Wahrscheinlichkeit 1 angenommen wird.

Präsenz: Sei $\Omega = \{\text{Kopf}, \text{Zahl}\}$ und $X(\text{Kopf}) = 1, X(\text{Zahl}) = -1$.
Berechne Erwartungswert und Varianz als Funktion von $\text{Pr}(\text{Kopf})$.

Unimodale, symmetrische, schnell-abfallende Verteilungen sind durch Erwartungswert und Varianz gut beschrieben...



$$\begin{aligned} \mu &= \mathbb{E}(X) \\ \sigma &= \sqrt{\text{Var}(X)} \end{aligned}$$



...im Allgemeinen gibt es aber viele Verteilungen, die mit gegebenen Erwartungswert und Varianz verträglich sind.

Das k-te Moment von X ist

$$m_k := \mathbb{E}(X^k), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Erwartungswert und Varianz entsprechen den ersten beiden Momenten. Wenn *alle* Momente bekannt sind, liegt die Verteilung i.d.R. eindeutig fest. Statt durch Maße oder Dichten, kann man daher Verteilungen auch durch

Momente beschrieben. Oft ist das einfacher. Wir werden dies für das wichtige Beispiel von Eigenzuständen des harmonischen Oszillators sehen.

2.4 Statistik

In der Wahrscheinlichkeitstheorie setzt man eine Verteilung als gegeben voraus, und erforscht die Konsequenzen.

Die *Statistik* behandelt das dazu inverse Probleme: Man beginnt mit beobachteten Daten und versucht daraus Schlüsse über die zugrundeliegende Verteilung zu ziehen.

Für die meisten empirischen Wissenschaften ist die Statistik das zentrale Werkzeug, um zu Erkenntnissen über die Wirklichkeit zu gelangen. Die eine Ausnahme ist... ..die Physik. So wird Statistik im Studium nicht gelehrt und viele aktive Physikerinnen und Physiker verstehen die Theorie nicht gut. (Schlimmer noch - in einem Angriff auf den [George Orwell](#) und die [Strategen der Microsoft Corporation](#) neidische sein könnten, ignoriert die Physik die Statistik nicht nur, sondern hat sich des Begriffs bemächtigt und seine Bedeutung einfach umgedreht. Häufig wird *statistisch* hier irreführend als Synonym für *Wahrscheinlichkeiten betreffend* verwendet. Zum Beispiel müsste die *Statistische Physik* eigentlich *Probabilistische Physik* heißen.) Warum dem so ist, das halte ich für eine sehr interessante Frage... ..die wir aber lieber in der Präsenzveranstaltung diskutieren. Bis auf Weiteres schließe ich mich der schlechten Tradition an, und ignoriere die Statistik.

- Wahrscheinlichkeitsverteilungen können durch **Maße**, **Dichten** oder **Momente** beschrieben werden
- Wenn man ein Zufallsexperiment oft wiederholt, dann tendiert der Mittelwert der Ergebnisse gegen den **Erwartungswert**
- Die **Varianz** ist ein Maß für die Streuung einer Variable um den Mittelwert
- Wir interpretieren Wahrscheinlichkeiten als eine **Eigenschaft von Anleitungen für wiederholbare Zufallsexperimente**. Andere Interpretationen sind aber auch möglich und nützlich.

3.1 Hilberträume

Zuvor haben wir Präparationen und Messausgänge mit komplexen Vektoren, und Wahrscheinlichkeiten mit inneren Produkten in Verbindung gebracht.

Mathematisch führt uns das zur Theorie der Hilberträume: komplexe Vektorräume mit einem sesquilinearen inneren Produkt.

In der VL brauchen wir vor allem zwei Arten von Hilberträumen:

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

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

$$\mathbb{C}^d = \left\{ v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_d \end{pmatrix} \mid v_i \in \mathbb{C} \right\}$$

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

(*)
$$\langle v | w \rangle = \sum_{i=1}^d \overline{v_i} w_i$$

Eigenschaften:

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

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

③ \leadsto man erhält eine

Norm $\|v\|^2 = \langle v | v \rangle \geq 0$

Gleichheit $\Leftrightarrow v=0$.

( Die Konvention in der Mathematik ist umgekehrt.)

Das nennt man ein sesqui-lineares inneres Produkt.
 \uparrow "1/2"

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

Anwendung: Teilchen mit n Freiheitsgraden.

Addition und Skalarmultiplikation ist punktweise:

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

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

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

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

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

- Die Menge der Fkt. auf dem \mathbb{R}^m hat keine endliche Basis
- ist also ∞ -dimensional.

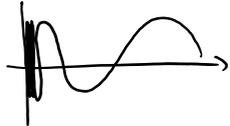
3.1.1 Anmerkungen zu
Funktionsräumen

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

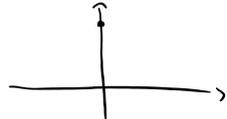
a) Innere Produkte können ∞ sein.

Bsp.:
 $n=1$ $f(x) = 1 \rightarrow \langle f | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = \infty.$ ⋮

b) Funktionen können nicht integrierbar sein.

Bsp.: $f(x) = \begin{cases} \sin 1/x & x \neq 0 \\ 0 & x = 0 \end{cases}$  ⋮

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

Bsp.: $f(x) = \begin{cases} 1 & x = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$  ⋮

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

$$L^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f \mid \int_{\mathbb{R}^n} |f(\vec{x})|^2 d^n \vec{x} \text{ existiert und } < \infty \text{ ist} \right\}$$
 ⋮

$$\left\{ f \text{ wie oben} \mid \int_{\mathbb{R}^n} |f(\vec{x})|^2 d^n \vec{x} = 0 \right\}$$

Technisch ist $L^2(\mathbb{R}^n)$ ein *Quotientenvektorraum*: Die quadratintegralen 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 quadratintegraler 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 uns mit diesen technischen Details (fast) nie beschäftigen müssen.

• Man nennt $L^2(\mathbb{R}^n)$ die quadratintegralen Fkt.

• Es gilt $\forall f \in L^2(\mathbb{R}^n)$: ① $\|f\| < \infty$ ② $\|f\| = 0 \Leftrightarrow f = 0$.

Diese beiden Eigenschaften gehören zur math. Def. eines H.R.

3.2 Lineare Operatoren

Erinnerung an die LA:

Eine Abbildung A zwischen zwei Vektorräumen ist linear wenn:

$$A(\phi + \psi) = A(\phi) + A(\psi), \quad A(\lambda \cdot \phi) = \lambda A(\phi).$$

In der QM heißen lineare Abb. $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ Operatoren.

Bsp.:

① $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$

Hier kann man Operatoren bequem als Matrizen angeben:

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \dots$$

② $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) =$ quadrat-integrierte komplexwertige Fkt. auf \mathbb{R} .

Der Multiplikationsoperator (oder Ortsoperator) X agiert auf $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ so:

$$(X\psi)(x) = x\psi(x)$$

Prüfe Linearität:

$$\begin{aligned} (X(\psi + \lambda\phi))(x) &= x(\psi + \lambda\phi)(x) \\ &= x\psi(x) + \lambda x\phi(x) \\ &= (X\psi)(x) + \lambda(X\phi)(x). \quad \checkmark \end{aligned}$$

Der Ableitungsop. (oder Impulsoperator für $\hbar=1$) ist

$$P = -i \frac{d}{dx} : \psi \mapsto P(\psi) = -i\psi'$$

Prüfe Linearität: $P(\phi + \lambda \psi) = -i \frac{d}{dx} (\phi + \lambda \psi)$

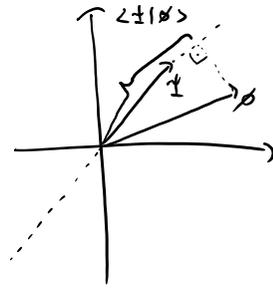
$$= -i \frac{d}{dx} \phi + \lambda i \frac{d}{dx} \psi$$
$$= P(\phi) + \lambda P(\psi). \quad \checkmark$$

3.3 Dirac-Notation

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 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert ein lineares Funktional:

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



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

$$\begin{aligned} (*) \quad \langle \psi | (|\phi\rangle) &= \langle \psi | \phi \rangle \\ \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow & \\ \text{"bra von Ket"} \quad & \text{braket.} \end{aligned}$$

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 *Darstellungssatz 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 $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ eine lineare Abb. $|\phi\rangle\langle\psi|: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ macht.

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

$$(\Delta) \quad \mathcal{H} \ni |\beta\rangle \mapsto |\phi\rangle\langle\psi|(|\beta\rangle) := |\phi\rangle(\langle\psi|\beta\rangle)$$

Dem Ausdruck $|\phi\rangle\langle\psi|\beta\rangle$ kann man auf zwei Arten lesen:

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

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

3.3a Dirac-Notation: Fragen und Antworten

1. Haben wir neue Objekte eingeführt? Gibt es einen Unterschied zwischen $|\psi\rangle$ und ψ ?

Nein und nein. Die Dirac-Notation ist nur eine alternative Schreibweise. Für $\psi \in \mathcal{X}$ ist $\psi = |\psi\rangle$.

2. Warum brauchen wir das dann?

Man braucht das gar nicht. Es gibt Lehrbücher ganz ohne Ket s. Aber eine gute Notation macht das Leben leichter. (Wer römische Zahlen kennt braucht keine arabischen - kann mit arabischen aber leichter rechnen).

3. Was nutzen die Bücher ohne Dirac-Notation stattdessen?

Es gibt sehr viele Alternativen:

	Geometrie	angewandte Mathematik	Relativitätstheorie (über \mathbb{R})	elementare LA	QM	...
Vektor	ϕ	ϕ	ϕ^i	Spaltenvekt. $\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_d \end{pmatrix}$	$ \phi\rangle$	
duale Vekt.	ϕ^b	ϕ^*	ϕ_i	Zeilenvekt. $(\bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_d)$	$\langle \phi $	
inneres Produkt	(ϕ, ψ)	$\phi^* \psi$	$\phi^i \psi_i$	$(\bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_d) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_d \end{pmatrix}$	$\langle \phi \psi \rangle$	

4. Gelten für bra-kets die gleichen Rechenregeln wie für das innere Produkt auf dem Hilbertraum?

Ja. Ein bra-ket ist das innere Produkt. Siehe 1.

5. Dualvektoren machen mir Kopfschmerzen. Bin ich für die QM verloren?

Nein. Die Rechenregel $\langle \psi | \phi \rangle = \text{inneres Produkt}$ ist trivial anwendbar, ohne dass man $\langle \psi |$ als " $\in \mathcal{H}^*$ " identifizieren muss.

6. Wenn $|\psi\rangle = \psi$, ist dann $\langle \psi | = \langle \psi | ?$

Ja. Allerdings sieht das doof aus. Alternative:

Def.: ${}^+ : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$
 $|\psi\rangle \mapsto |\psi\rangle^+ := \langle \psi |$

Sesquilinearität $\rightarrow (\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle)^+ = \alpha|\psi\rangle^+ + \bar{\beta}|\phi\rangle^+ \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$

Wenn man z.B. das Funktional zu $\sum_i \psi_i |e_i\rangle$ ausrechnen möchte, würde man schreiben:

$$\left(\sum_i \psi_i |e_i\rangle \right)^+ = \sum_i \bar{\psi}_i \langle e_i |,$$

was das gleiche ist wie

$$\left\langle \sum_i \psi_i |e_i\rangle \right| = \sum_i \bar{\psi}_i \langle e_i |,$$

aber besser aussieht.

[Später werden wir $+$ für Operatoren einführen...]

3.4 Basen und Matrixdarstellungen

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

$$\begin{aligned} \text{z.Z.: } |\psi\rangle & \stackrel{!}{=} \left(\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \right) |\psi\rangle \\ & = \left(\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \right) \left(\sum_j \psi_j |e_j\rangle \right) \\ & = \sum_j \psi_j |e_i\rangle \langle e_i | e_j \rangle = |\psi\rangle. \quad \square \end{aligned}$$

$$= \sum_{ij} \psi_j |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i | e_j \rangle}_{\delta_{ij}} = |\psi\rangle. \quad \square$$

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:

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

- ② Analoge Formel für Bras:

$$\langle \psi | = \dots = \sum_i \bar{\psi}_i \langle e_i |.$$

- ③ Formel für innere Produkte im beliebiger ONB:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \dots = \sum_i \bar{\psi}_i \phi_i.$$

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

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

- ⑤ Beschreibung von Operatoren durch Matrix-Elemente:

$$A = \mathbb{1} A \mathbb{1} = \sum_{ij} |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i | A | e_j \rangle}_{A_{ij}} \langle e_j | = \sum_{ij} A_{ij} |e_i\rangle \langle e_j| \quad \text{mit} \quad A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle = \langle e_i | A e_j \rangle$$

↑
"Matrix-Elemente" von

$$i \quad \overbrace{\quad} \quad j$$

$$A_{ij}$$

↑
 "Matrix-Elemente von
 A bzgl. $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^d$ -Basis"

Damit:

Jede ONB $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^d$ stellt 1-1-Verbindung zwischen H.R. \mathcal{H} und dem Raum \mathbb{C}^d der Spaltenvektoren her.

Konkret:

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

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

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

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...

Damit:

In der QM werden V.R. oft über eine ONB eingeführt.

Bsp: "Sei \mathcal{H} der H.R. mit Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$."

Übung: Schreiben Sie $\begin{cases} \sigma_z := |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \\ \sigma_x := |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \end{cases}$ jeweils als Matrizen.

Berechnen Sie $\sigma_z \sigma_x$ mit Dirac-Notation und als Matrixprodukt und überprüfen Sie, dass Ergebnisse kompatibel sind.

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...

3.5 Adjungierte Operatoren

Erinnerung: Im \mathbb{R}^d mit Euklidischem S.P. $(u, v) = \sum_i u_i v_i$ gilt:

$$(u, Av) = (A^t u, v) \quad \text{mit } (A^t)_{ij} = A_{ji}.$$

Analoge Konstruktion für Hilberträume:

- Sei $\{|i\rangle\}_i$ eine ONB
- $A = \sum_{ij} A_{ij} |i\rangle\langle j|$ ein Operator.

Der adjungierte Operator ist

$$(1) \quad A^+ := \sum_{ij} \overline{A_{ji}} |i\rangle\langle j| \quad \text{"Transposition + komplex. konj."}$$

Es gilt $\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$:

$$(2) \quad \langle \phi | A \psi \rangle = \langle A^+ \phi | \psi \rangle$$

und (1) ist die eindeutige Lsg. zu (2).

Bew.: Übung.

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

Bsp.: ① Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

② Impulsoperator

Beh.: $P = -i \frac{d}{dx}$ ist hermitesch.

Bew.:

$$\begin{aligned} \langle \phi | P \psi \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi(x)} \left(-i \frac{d}{dx} \psi(x)\right) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i \frac{d}{dx} \overline{\phi(x)}\right) \psi(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\left(-i \frac{d}{dx} \phi(x)\right)} \psi(x) dx = \langle P \phi | \psi \rangle \quad \square \end{aligned}$$

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

$$\left(z |\alpha\rangle \langle \beta| \right)^{\dagger} = \bar{z} |\beta\rangle \langle \alpha|.$$

Bew.: Übung.

3.6 Spektraldarstellung

Erinnerung:

Ihr alter Freund, die Eigenwertgleichung:

Gegeben $A: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$, finde alle $\lambda_i, |\psi_i\rangle$ s.d.

$$A|\psi_i\rangle = \lambda_i |\psi_i\rangle$$

↙ Eigenvektoren
↑ Eigenwerte

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

Eine Spektraldarstellung von A ist eine Darstellung der Form

$$(S) \quad A = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

mit $\lambda_i \in \mathbb{C}$, $\{|\psi_i\rangle\}_i$ eine ONB.

Gegeben (S), rechne

$$A|\psi_j\rangle = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \underbrace{\langle \psi_i | \psi_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \lambda_j |\psi_j\rangle.$$

Damit gezeigt:

A hat ein S.D. \Leftrightarrow man kann eine ONB aus E.V. finden.
(eine (orth.) Eigenbasis).

Hermitesche Op. sind eine wichtige Klasse von Op. die eine Spektrald. haben:

Beh: Äquivalent sind (fürs erste im endlich-dimensionalen):

① A ist hermitesch: $A = A^+$

② A hat orthog. Eigenbasis und reelle E.W.

Beweis:

② \Rightarrow ① Vergleiche letzte Lektion.

① \Rightarrow ② Übung.

Anmerkungen:

- Viele Fragen über Operatoren lassen sich beantworten, wenn man die Spektralzerlegung kennt. In der Praxis heißt "Quantenmechanik machen" daher häufig "Spektralzerlegungen finden". (Ich hoffe, das enttäuscht Sie nicht...).
- Wenn man einen Operator in seiner Eigenbasis darstellt, ist der diagonal, mit den Eigenwerten auf der Hauptdiagonalen. Man sagt daher man "diagonalisiert" den Operator, wenn man die Spektralzerlegung sucht.

3.6.1 Funktionen von Operatoren

Sei $A = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ eine Spektralzerlegung.

Rechnen: $A^2 = \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j |\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_i|\psi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle\psi_i| = \sum_i \lambda_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

Ebenso: $A^k = \dots = \sum_i \lambda_i^k |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

Ebenso, für ein Polynom $p(x) = \sum_k c_k x^k$ gilt

$$p(A) = \dots = \sum_i p(\lambda_i) |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Zuletzt für Fkt. mit Taylorreihe $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$:

$$f(A) = \dots = \sum_i f(\lambda_i) |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

Also, mit Hilfe der Spektraldarstellung kann man "Funktion von Operator" durch "Funktion von Eigenwerten" ausdrücken. Letzteres ist häufig viel einfacher.

Ausblick: Die Zeitentwicklung eines Quantensystems wird durch die *Schrödingergleichung* beschrieben. Sie zu lösen ist äquivalent dazu, die Exponentialfunktion eines Operators (des *Hamiltonoperators*) zu berechnen. Dazu nutzt man die Spektraldarstellung. Eine zentrale Aufgabe ist es also, die Eigenwertgleichung für den Hamiltonoperator zu lösen. Man nennt diese Eigenwertgleichung die *stationäre Schrödingergleichung*.

Anmerkung: Sei f eine Funktion, die keine Taylorreihe hat. Dann *definiert* man $f(A)$ über

die Formel (*). Diesen Ansatz nennt man *Spektralkalkül*.

3.6.2 Spektren im ∞ -dimensionalen:

Das Problem

In unendlichdimensionalen Räumen gilt die zuvor eingeführte Version der Spektralzerlegung für hermitesche Operatoren nicht immer. Probleme treten dann auf, wenn die Eigenwerte kontinuierliche Werte annehmen können. Wir zeigen hier zwei Beispiele. In der nächsten Lektion führen wir dann einen verallgemeinerten Ansatz ein, um das Problem zu lösen.

① Impulsoperator $P = -i \frac{d}{dx}$.

E.W. - Gleichung:

$$-i \psi' = k \psi \Leftrightarrow \psi(x) = c e^{ikx}$$

Aber: $\|\psi\|^2 = |c|^2 \int 1 dx = \infty$.

$\leadsto P$ hat keine E.V. in $L^2(\mathbb{R})$. \bar{i}

② Ortsoperator $(X\psi)(x) = x\psi(x)$.

E.W. - Gl.:

$$x\psi(x) = \lambda\psi(x) \Leftrightarrow \psi(x) = \begin{cases} c & x = x_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{für geeignetes } x_0$$

Aber: $\|\psi\|^2 = 0$.

\leadsto Auch E.V. vom X nicht in $L^2(\mathbb{R})$. \bar{i}

3.6.3 Spektren im ∞ -dimensionalen

Um den Orts- und den Impulsoperator diagonalisieren zu können, erweitern wir den Hilbertraum um zusätzliche Objekte, die nicht normalisierbaren Funktionen entsprechen. Zunächst zeigen wir, wie das formal unser Problem löst. Ob man das "darf" - also ob konzeptionelle und mathematische Probleme damit einhergehen, darauf gehen wir später ein.

① δ -Distributionen

Die δ -Distribution $\delta_{x_0}(\cdot)$ ist ein formales Objekt, dessen inneres Produkt mit einer glatten Fkt. ϕ per Definition durch

$$\langle \delta_{x_0} | \phi \rangle = \int \delta_{x_0}(x) \phi(x) dx := \phi(x_0) \quad (1)$$

gegeben ist.

Der Ausdruck

$$\int x |\delta_x\rangle \langle \delta_x| dx$$

ist dann eine Spektralzerlegung von X im dem Sinn dass für glatte ϕ, ψ man mit ① das richtige Ergebnis erhält:

$$\begin{aligned} & \langle \phi | \left[\int x |\delta_x\rangle \langle \delta_x| dx \right] | \psi \rangle \\ &= \int x \underbrace{\langle \phi | \delta_x \rangle}_{\bar{\phi}(x)} \langle \delta_x | \psi \rangle dx = \int \bar{\phi}(x) x \psi(x) dx = \langle \phi | X | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Damit werden wir arbeiten können!

Im gleichen Sinn gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\int |\delta_x\rangle \langle \delta_x| dx = \mathbb{1}$$

Also:

$$\langle \phi | \left[\int |\delta_x\rangle \langle \delta_x| dx \right] | \psi \rangle = \int \tilde{\phi}(x) \psi(x) = \langle \phi | \mathbb{1} | \psi \rangle .$$

Häufig schreibt man kurz: $|\delta_x\rangle = |x\rangle$.

II

Ebene Wellen

Definiere die Fkt. $|k\rangle$ durch

$$\langle x | k \rangle = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx} .$$

Dann ist, für jede glatte Fkt. $|\phi\rangle$:

$$\langle k | \phi \rangle = (2\pi)^{-1/2} \int e^{-ikx} \phi(x) dx = \mathcal{F}[\phi](k) = \tilde{\phi}(k) .$$

die Fourier-transformierte von ϕ ausgewertet bei k .

Beh.:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle \langle k| dk = \mathbb{P}$$

Bew.:

$$\langle x | \left[\int |k\rangle \langle k| dk \right] | \phi \rangle = (2\pi)^{-1/2} (-i) \int e^{ikx} i k \tilde{\phi}(k) dk = -i \phi'(x) \quad \square$$

Ebenso gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\left[\int |k\rangle \langle k| dk \right] = \mathbb{1}$$

Bew.: Übung.

Bew.: Übung.

3.6.4 Bsp.: Ableitungen und Translationen

Anwendung der Spektralzerlegung:

$$\langle x | e^{itP} | \phi \rangle = \langle x+t | \phi \rangle.$$

Eher nicht:
$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t \partial_x)^k}{k!} \phi(x)$$

Lieber so:
$$\langle x | \underbrace{\left[\int e^{itk} |k\rangle \langle k| dk \right]}_{e^{itP}} | \phi \rangle = (2\pi)^{-1/2} \int e^{ik(x+t)} \tilde{\phi}(k) dk$$

$$= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\phi}](x+t) = \phi(x+t). \quad \square$$

$$P = \int_{\mathbb{R}} k |k\rangle \langle k| dk$$

$$e^{itP} = \int e^{itk} |k\rangle \langle k| dk$$

3.7 Unitäre Operatoren

Erinnerung: Im \mathbb{R}^n mit Euklidischem S.P. $(u, v) = \sum_i u_i v_i$ gilt:

O erhält inneres Produkte: $(Ou, Ov) = (u, v) \quad \forall u, v \in \mathbb{R}^d$

$$\Leftrightarrow O^t O = \mathbb{1} \quad (\Leftrightarrow O^t = O^{-1} \quad \Leftrightarrow O O^t = \mathbb{1}).$$

Solche O 's heißen orthogonal.

Analog für Hilberträume:

U erhält inneres Produkte: $\langle U\psi | U\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$

$$\Leftrightarrow U^+ U = \mathbb{1} \quad (\Leftrightarrow U^+ = U^{-1} \quad \Leftrightarrow U U^+ = \mathbb{1}).$$

Solche U 's heißen unitär. Menge aller unitären Operatoren

ist die unitäre Gruppe $U(\mathcal{H})$.

Ausblick: Wir werden bald sehen, dass unitäre Operatoren die quantenmechanische Version von "hamiltonschen Flüssen" sind. Sie beschreiben sowohl Zeitentwicklungen, wie auch Symmetrietransformationen (vergl. das Hamiltonsche Noether-Theorem).

Bsp:

① Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

(Die sind also sowohl hermitesch wie auch unitär ... wo gibt's denn sowas?)

② Sei $\Phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ volumenerhaltend: $\left| \det \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} \right)_{i,j} \right| = 1$.

$\Rightarrow (U_\Phi[\psi])(\vec{x}) := \psi(\Phi^{-1}(\vec{x}))$ definiert unitären Operator.

Einfachstes Bsp.: Translation in 1-D: $T_a[\psi](x) = \psi(x-a)$.

③ Fourier-Transf. Wir haben die FT bislang als "passive" Transf. interpretiert, die die Ortsdarstellung $\phi(x)$ und die Fourierdarstellung (oder Impulsdarst.) $\tilde{\phi}(k)$ der selben Fkt. ineinander umwandelt.

Im der QM wird auch aktive Interpret. verwendet, also $\mathcal{F}[\phi](x)$ als neue Fkt. (statt alternative Darst. der gleichen Fkt.) verstanden. \mathcal{F} als Operator auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ist unitär:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \phi | \left[\int |k\rangle \langle k| dk \right] | \psi \rangle \\ &= \int \overline{\tilde{\phi}(k)} \tilde{\psi}(k) dk \\ &= \int \overline{\tilde{\phi}(x)} \tilde{\psi}(x) dx = \langle \tilde{\phi} | \tilde{\psi} \rangle. \quad \square \end{aligned}$$

Äquivalent sind

① U ist unitär

② U hat Spektraldarst. $U = \sum_i e^{i\phi_i} |f_i\rangle \langle f_i|$ mit $|\lambda_i| = 1$, also $\lambda_i = e^{i\phi_i}$, $\phi_i \in \mathbb{R}$.

② U hat Spektraldarst. $U = \sum_i e^{i\phi_i} |f_i\rangle\langle f_i|$ mit $|\lambda_i| = 1$, also $\lambda_i = e^{i\phi_i}$, $\phi_i \in \mathbb{R}$.

③ $U = e^{-iA}$ mit $A = A^\dagger$ hermitesch.

④ $\|U|\psi\rangle\|^2 = \|\psi\|^2 \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Anmerkungen:

- Zu 2 und 3: Man kann sich in diesem Sinn hermitesche Operatoren als Verallgemeinerung von reellen Zahlen, und unitäre Operatoren als Verallgemeinerung von komplexen Zahlen mit Betrag eins vorstellen.
- Zu 3: Dieser Zusammenhang zwischen unitären und hermiteschen Operatoren ist zentral für die Behandlung der Schrödingergleichung und der quantenmechanischen Version des Noether-Theorems.
- Zu 4: Da das Normquadrat einfach das innere Produkt eines Vektors mit sich selbst ist, bedeutet dies, dass es ausreicht, wenn man in der Definition von Unitarität am Anfang dieser Seite den "diagonalen" Spezialfall $\phi = \psi$ betrachtet. Das ist vielleicht überraschend. Analoge Eigenschaften treten häufig in Physik und Mathematik auf, wenn man "symmetrische Formen" (das Euklidische innere Produkt, das sesquilineare innere Produkt, vollständig symmetrische Tensoren, bosonische Wellenfunktionen...) betrachtet. Den Schluss vom diagonalen auf den allgemeinen Fall nennt man "[Polarisation](#)".

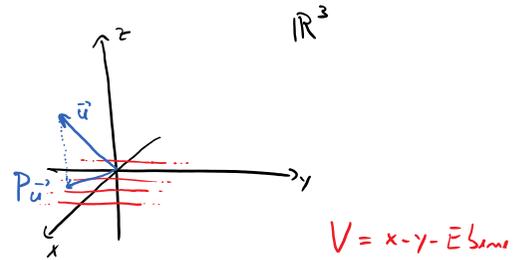
3.8 Projektoren

Erinnerung: Im \mathbb{R}^m mit Euklidischem S.P. $(u, v) = \sum_i u_i v_i$ gibt es 1-1-Beziehung zwischen

- Unterräumen $V \subset \mathbb{R}^m$

und

- orthog. Projektionen P
 $P = P^t, P^2 = P$.



Analoge Konstruktion für Hilberträume:

Def.: P ist Projektor wenn ① $P = P^t$ und ② $P^2 = P$.

Aus ① $\Rightarrow P$ hat Spektraldarst. Aus ② \Rightarrow E.W. $\in \{0, 1\}$.

$\leadsto P = \sum_i |\pm_i\rangle \langle \pm_i|$. Die $|\pm_i\rangle$ sind ONB für den UR $V \subset \mathcal{H}$ auf den P projiziert.

Bsp.: ① Für jeden normierten Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist $|\psi\rangle \langle \psi|$ der Projektor auf $V = \{z|\psi\rangle \mid z \in \mathbb{C}\}$.

② Übung: Zeigen Sie, dass $\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$ ein Projektor ist und finden Sie eine Spektraldarstellung.

③ Definieren den Paritätsoperator Π auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ durch
 $\langle x | \Pi | \phi \rangle = \langle -x | \phi \rangle$ (also $(\Pi \phi)(x) = \phi(-x)$).

Zeige: $P_{\pm} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} \pm \Pi)$ sind jeweils Projektoren.

Auf welche Räume projizieren sie?

Bonus: Können Sie eine Spektraldarst. von P_{\pm} finden?

3.9 Verschiedenes

Hier sammeln wir verschiedene Konzepte, die Sie entweder aus der LA schon gut kennen sollten, oder die wir nicht unmittelbar brauchen.

Schauen Sie mal drüber und gelegentlich hinein.

3.9.1 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 $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ 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:

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

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

3.9.2 Entartung

Sei A ein Operator, λ ein Eigenwert.

Der dazugehörige Eigenraum ist

$$\mathcal{X}_\lambda := \{ |\pm\rangle \mid A|\pm\rangle = \lambda |\pm\rangle \}.$$

Man sagt: λ ist entartet wenn $\dim \mathcal{X}_\lambda > 1$.

Wenn A eine Spektralzerlegung hat, kann man sie so schreiben:

$$A = \sum_{\text{E.W. } \lambda} \sum_{i=1, \dots, \dim \mathcal{X}_\lambda} \lambda |\pm_{\lambda,i}\rangle \langle \pm_{\lambda,i}| \quad (1)$$

$$= \sum_{\text{E.W. } \lambda} \lambda P_\lambda \quad (2)$$

wobei für jedes λ gilt:

- $\{ |\pm_{\lambda,i}\rangle \}_{i=1}^{\dim \mathcal{X}_\lambda}$ ist eine ONB für \mathcal{X}_λ
- P_λ ist der Projektor auf \mathcal{X}_λ .

3.9.3 Kommutierende Operatoren

Seien A, B Operatoren.

Wir nehmen an, dass es eine gemeinsame Eigenbasis gibt:

$$A |x_i\rangle = a_i |x_i\rangle,$$

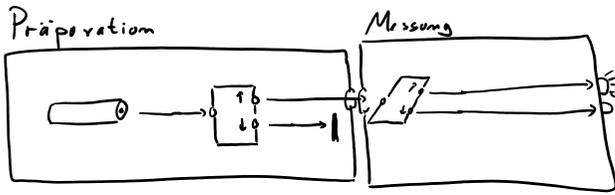
$$B |x_i\rangle = b_i |x_i\rangle.$$

$$\Rightarrow [A, B] |x_i\rangle := (AB - BA) |x_i\rangle = (a_i b_i - b_i a_i) |x_i\rangle = 0 \quad \forall i,$$

also Kommutieren die Operatoren: $AB = BA$.

- Die Umkehrung gilt: $[A, B] = 0 \Rightarrow \exists$ gemeinsame Eigenbasis.
- Achtung: Wenn es entartete E.W. gibt, ist nicht jede E.B. des einen Operators auch eine E.B. des anderen (Geman?).
- Seien A_1, \dots, A_k kommutierende Operatoren: $[A_i, A_j] = 0$.
Dann gibt es eine gemeinsame E.B. $\{|x_i\rangle\}_i$ für alle:
$$A_j |x_i\rangle = a_i^{(j)} |x_i\rangle.$$

4.1 Postulate der QM [diskrete projektive Messungen, reine Zustände]



Wir müssen nun die mathematischen Begriffe mit physikalischen Konzepten in Verbindung bringen. Die Entsprechung nennt man häufig die *Postulate* oder *Axiome* der QM. Wir fangen hier mit den wichtigsten Spezialfällen an und werden später allgemeinere Postulate ergänzen.

① Jeder Art von quantenmech. System kann ein HR \mathcal{X} zugeordnet werden.

② Messungen [diskret, projektiv]

Betrachte eine Messvorschrift mit diskreter Menge Λ möglicher Ergebnisse λ .

Jedem Ergebnis λ ist ein Projektor P_λ zugeordnet, mit

- Orthogonalität: $P_\lambda P_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} P_\lambda$,

- Vollständigkeit: $\sum_\lambda P_\lambda = \mathbb{1}$.

③ Präparationen [reine Zustände]

Einer Anleitung zur Präparation eines Quantensystems ist ein normierter Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{X}$ zugeordnet.

Es gilt die Bornsche Regel [disk., proj. Messung an reinem Zst.]

- Wahrscheinlichkeit $P_\psi(\lambda)$ das Ergebnis λ zu erhalten

$$P_{\pm}(\lambda) = \text{Tr}(P_{\lambda} |\psi\rangle\langle\psi|)$$

- Direkt nach der Messung ist dem System der Vektor

$$\frac{P_{\lambda} |\psi\rangle}{\sqrt{\text{Tr} P_{\lambda} |\psi\rangle\langle\psi|}}$$
 zugeordnet.

4.2 Zustände und Observablen

Zustände:

- Der Projektor $|\psi\rangle\langle\psi|$ auf $|\psi\rangle$ heißt Zustand (oder Dichtematrix).

Der Vektor $|\psi\rangle$ heißt Zustandsvektor oder Wellenfkt. (oder Zustand).

- Die Wahrscheinlichkeit hängt nur vom $|\psi\rangle$ nur mittels des Projektors $|\psi\rangle\langle\psi|$ ab.

→ Sei $\phi \in \mathbb{R}$, setze $|\psi'\rangle = e^{i\phi} |\psi\rangle$. Dann:

$$|\psi'\rangle\langle\psi'| = e^{i\phi} |\psi\rangle\langle\psi| e^{-i\phi} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

→ "Globale Phasen" dieser Art beeinflussen die Physik nicht.

Observablen:

- Nehmen wir an, die Ergebnisse λ sind reelle Zahlen.

Statt einer Zuordnung $\lambda \mapsto P_\lambda$ kann man äquivalent den Hermiteschen Op.

$$\hat{A} = \sum_{\lambda} \lambda P_{\lambda}$$

angeben (vergl. "Spektraldest."). Einen solchen Op. nennt man Observable.

Damit kann man praktisch Erwartungswerte ausrechnen:

Def. Zufallsvariable A mit $p_A(\lambda) = \text{Tr } P_{\lambda} |\psi\rangle\langle\psi|$.

→ Erwartungswert:

$$E(A) = \sum_{\lambda} \lambda P_{\pm}(\lambda) = \sum_{\lambda} \lambda \operatorname{tr} P_{\lambda} |\psi\rangle\langle\psi| = \operatorname{tr} \left(\underbrace{\sum_{\lambda} \lambda P_{\lambda}}_{\hat{A}} \right) |\psi\rangle\langle\psi| = \operatorname{tr} \hat{A} |\psi\rangle\langle\psi| = \langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \langle \hat{A} \rangle.$$

• Wenn λ nicht entartet ist, ist P_{λ} von der Form $P_{\lambda} = |\phi_{\lambda}\rangle\langle\phi_{\lambda}|$

$$\leadsto P_{\pm}(\lambda) = \operatorname{tr} |\phi_{\lambda}\rangle\langle\phi_{\lambda}| |\psi\rangle\langle\psi| = |\langle\phi_{\lambda}|\psi\rangle|^2.$$

4.3 Hilbertraum und Observablen aus Symmetrien

Wie ordnet man Systemen Hilberträumen, und Messungen Operatoren zu?

"Raten und empirisch testen" ist keine falsche Antwort. Aus Erfahrungen heraus wurden auch eine Reihe heuristischer Quantisierungsregeln formuliert, die ganz gut funktionieren.

Der mit Abstand systematischste Zugang basiert auf der Analyse von Symmetrien.

Im Folgenden werden wir dieses Programm einmal durchschreiten, und zeigen, wie Rotationssymmetrie zur quantenmechanischen Beschreibung des Stern-Gerlach-Versuchs führt.

Schlechte Nachricht: Dies ist zwar das einfachste Beispiel - aber keinesfalls ein einfaches!

Gute Nachricht: Wenn Sie dem recht langen Argument beim ersten Mal nicht ganz folgen können, ist das kein großes Problem. Man kann mit der QM arbeiten, auch wenn man nicht genau weiss, wo die Modelle herkommen. Die zentrale technische Konstruktion - eine Darstellung der Drehgruppe - werden wir später in größerer Allgemeinheit wiederholen.

Übersicht:

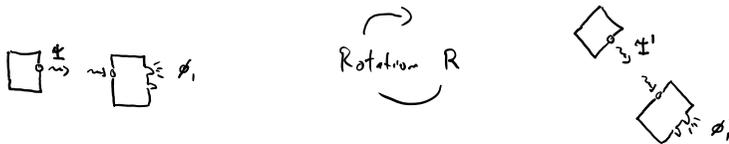
1. Der Satz von Wigner sagt, dass jeder Symmetrie ein (anti-) unitärer Operator zugeordnet werden kann
2. Für die Drehgruppe sind die Operatoren unitär. Sie formen eine *Darstellung* der Drehgruppe - d.h. Multiplikation von unitären entspricht der Verknüpfung von Symmetrien.
3. Symmetriegruppen - selbst die recht einfache Drehgruppe - sind komplizierte Objekte. Einfacher sind ihre "infinitesimalen" Versionen, die durch *Erzeugende* beschrieben werden.
4. Die (wichtige!) Baker-Campbell-Hausdorff-Formel besagt, dass Verknüpfungen von Symmetrien durch Kommutatoren von Erzeugern beschrieben werden.
5. Zuletzt finden wir eine Darstellung der Kommutatorrelationen der Drehgruppe durch 2×2 -Matrizen. Nun können wir ernten!

4.3.1 Symmetrien und Satz von Wigner

Erfahrungstasche - ("Isotropie des Raumes", "Keine Richtung ist ausgezeichnet"):

(1) Physik ist unter Rotationen invariant.

Insbesondere:



$$(1) \Rightarrow |\langle \psi | \phi \rangle|^2 = |\langle \psi' | \phi' \rangle|^2 \quad (2)$$

Welche Transf. $|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle$
 $|\phi\rangle \mapsto |\phi'\rangle$ sind mit (2) verträglich?

Bsp.: ① Wähle $U \in U(\mathcal{X})$, setze $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$.

② Wähle eine ONB $\{|e_i\rangle\}_i$, def.: $|\bar{\psi}\rangle = \sum_i \overline{\langle e_i | \psi \rangle} |e_i\rangle$

$$\Rightarrow \langle \bar{\psi} | \bar{\phi} \rangle = \overline{\langle \psi | \phi \rangle}.$$

Kombinieren: Wähle $U \in U(\mathcal{X})$, setze $|\psi'\rangle = U|\bar{\psi}\rangle$.

$$|\phi'\rangle = U|\bar{\phi}\rangle$$

Abb. dieser Art heißen anti-unitär.

Satz von Wigner:

Betrachte Abb. $|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle$ mit $|\langle \psi' | \phi' \rangle|^2 = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$
 $|\phi\rangle \mapsto |\phi'\rangle$

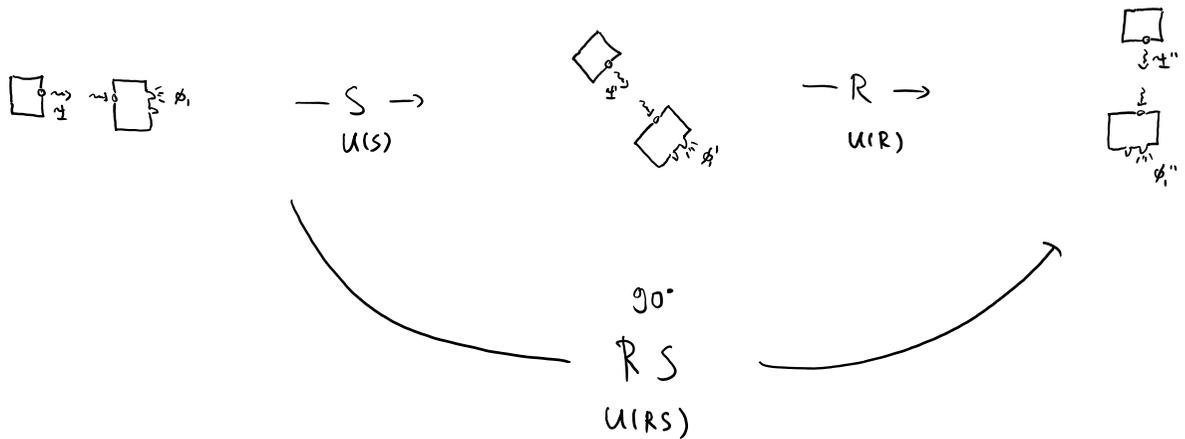
Dann gibt es ein unitäres oder anti-unitäres U s.d.

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$

$$|\phi'\rangle = U|\phi\rangle.$$

4.3.2 Symmetriegruppen und Darstellungen

Symmetrioperationen können verknüpft und invertiert werden. (Math.: Gruppe).



Da "R nach S" und "RS" physikalisch die gl. Op. beschreiben, muss gelten:

$$U(R)U(S) = e^{i\phi(R,S)} U(RS) \quad (*)$$

Beh.: $(*) \Rightarrow$ Für Rotationen R ist $U(R)$ unitär.

Bew.: Sei R eine Rotation. Kann schreiben: $R = S^2$, mit S Rot. um gleiche Achse, aber halben Winkel. $U(S)$ ist unitär oder anti-unitär. In beiden Fällen: $U(R) = U(S)U(S) = e^{-i\phi(S,S)}$ ist unitär, da zwei komplexe Konjugationen sich aufheben. \square

Def.: Eine Abb. Symmetriegruppe $\rightarrow U(\mathbb{R})$, $R \mapsto U(R)$ mit

$$U(R)U(S) = e^{i\phi(R,S)} U(RS)$$

$$\bullet U(\text{trivial}) = \mathbb{1}$$

heißt projektive, unitäre Darstellung.
 \uparrow
 (wenn $\phi(R,S) \neq 0$ sein kann).

Bsp: Darstellung der Rotationen auf $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) := \psi(R^{-1}(\vec{x})) = (\psi \circ R^{-1})(\vec{x})$$

\uparrow
"nach"

Dann: ① $U(\mathbb{1})\psi = \psi$. \checkmark

② $U(R)U(S)\psi = \psi \circ S^{-1} \circ R^{-1} = \psi \circ (R \circ S)^{-1} = U(RS)\psi$. \checkmark

Erzeugende davon:

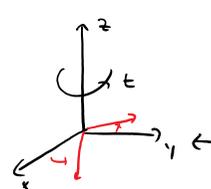
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Big|_0 [U(R_{z,t})(\psi)](\vec{x}) &= \frac{d}{dt} \Big|_0 \psi(R_{z,t}^{-1}(\vec{x})) \\ &= (\vec{\nabla} \psi) \cdot \left(\frac{d}{dt} \Big|_0 R_{z,t}^{-1}(\vec{x}) \right) \\ &= -(\vec{\nabla} \psi) \cdot \underbrace{\vec{e}_z \times \vec{x}}_{-\vec{e}_z \times \vec{x}} \\ &= \vec{e}_z \cdot \left(\underbrace{\vec{\nabla} \psi \times \vec{x}}_{\begin{pmatrix} \partial_x \psi \\ \partial_y \psi \\ \partial_z \psi \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} -i \partial_x \psi \\ -i \partial_y \psi \\ -i \partial_z \psi \end{pmatrix}} \right) \\ &= i \vec{P} \cdot \psi \\ &= i (\vec{P} \times \vec{X})_z \end{aligned}$$

4.3.3 Erzeugende

Um Hilberträume und Observablen zu konstruieren, müssen wir Symmetriegruppen besser verstehen.

Dieses Problem wird sehr viel einfacher, wenn man sich auf "infinitesimale Transformationen" beschränkt.

Bsp.:


$$R_{z,t} = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ +\sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbb{1} + t \overbrace{\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}^{\text{Erzeugende}} + O(t^2)$$

"infinitesimale Drehung"

Def.: Eine Familie G_t von linearen Abb. ($t \in \mathbb{R}$) heißt Einparameter-Gruppe wenn

① $G_0 = \mathbb{1}$

② $G_s G_t = G_{s+t}$

Beispiele sind Drehung um den Winkel t um eine Drehachse, oder (später) der *Zeitenwicklungsoperator*, der einen Zustand zum Zeitpunkt t_0 auf den Zustand zum Zeitpunkt $t_0 + t$ abbildet.

Alle solche Eine-Parametergruppen können vollständig durch ihr Verhalten um 0 herum beschrieben werden!

Dammi: Mit $g := \left. \frac{d}{dt} \right|_0 G_t$ gilt $G_t = e^{tg}$.

Bew.: Rechner:

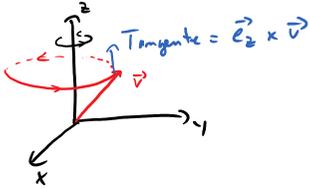
$$\left. \begin{aligned} \bullet \frac{d}{dt} G_t &= \frac{d}{d\tau} \Big|_0 G_{t+\tau} = \frac{d}{d\tau} \Big|_0 G_t G_\tau = G_t g \\ \bullet G_0 &= \mathbb{1} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{DGL} \\ \text{1. Ordnung} \end{array}$$

Gelöst durch e^{tg} :

$$\frac{d}{dt} e^{tg} = \frac{d}{dt} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(tg)^k}{k!} = \left[\sum_{k=1}^{\infty} \underbrace{\frac{k}{k!}}_{\frac{1}{(k-1)!}} (tg)^{k-1} \right] g = e^{tg} g. \quad \square$$

4.3.4 Erzeugende der Drehgruppe

Konkret: Was sind die Erzeugenden der Drehgruppe?



$$\frac{d}{dt} \Big|_0 R_{z,t} \vec{v} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \vec{v} = \vec{e}_z \times \vec{v}.$$

$$\leadsto \frac{d}{dt} \Big|_0 R_{\vec{\omega},t} \vec{v} = \vec{\omega} \times \vec{v} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{bmatrix}}_{\text{Erzeugende } \Gamma_{\vec{\omega}}} \vec{v}.$$

\leadsto Erzeugenden sind gegeben durch die Menge der anti-symmetrischen 3×3 -Matrizen.

Basis gegeben durch

$$\Gamma_x = \Gamma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Gamma_y = \Gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Gamma_z = \Gamma_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

4.3.5 Baker-Campbell-Hausdorff

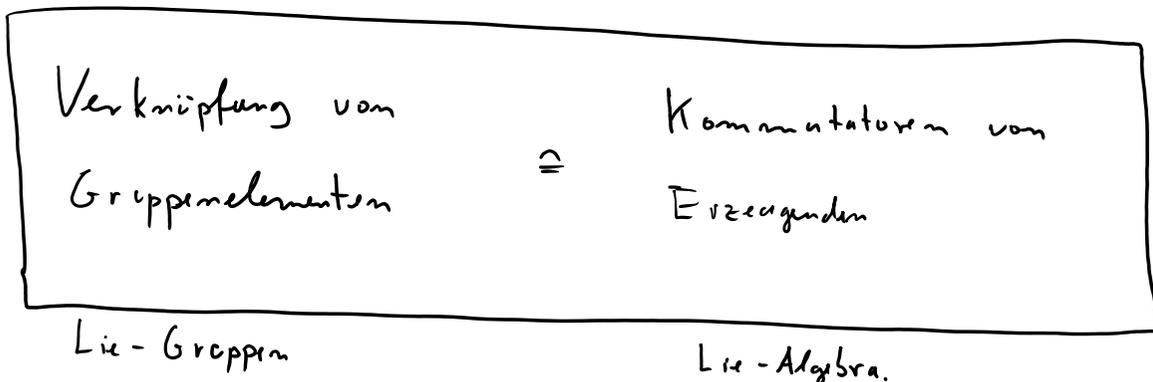
Wir können nun Rotationen als Exponenten ihrer Erzeugenden darstellen: $R_{\omega,t} = \exp(t r_{\omega})$.

Welche Eigenschaften der Erzeugenden sind wichtig?

$$R \cdot S = e^r e^s = e^{r+s + \frac{1}{2}[r,s] + \dots}$$

Terme höherer Ord.

Bew.: Übung.



Für Drehgruppe: $[r_1, r_2] = r_3$ und zyklisch:

allgemein:

$[r_i, r_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} r_k$

4.3.6 Darstellungen der Erzeugenden

Statt Darstellungen von Symmetriegruppen, kann man (leichter!) Darstellungen ihrer Erzeuger suchen.

Sei U eine Darstellung. Auch sie kann durch Erzeugende beschrieben werden:

$$U(\underbrace{1\mathbb{1} + t r + \dots}) = U(1\mathbb{1}) + t \underbrace{u(r)} + \dots$$

$$\frac{d}{dt} \Big|_0 U(1\mathbb{1} + t r)$$

und

$$U(R)U(S) = U(RS) \Leftrightarrow [u(r), u(s)] = u([r, s])$$

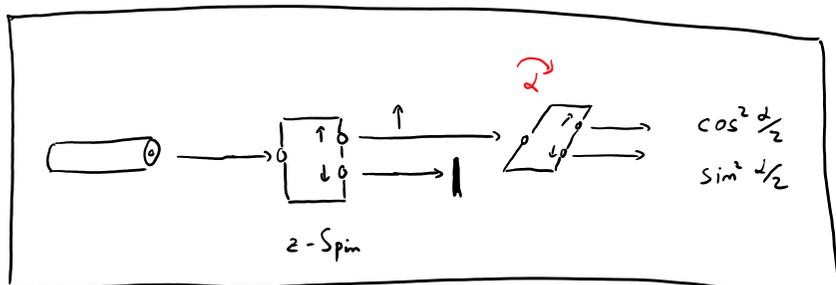
↑
Für $R, S \propto 1\mathbb{1}$

Also: Die Erzeugenden $u(r)$ der Darstellung müssen die gleichen Vertauschungsrelationen erfüllen, wie die ursprünglichen Erzeugenden!

Für die Drehgruppe: Suche Operatoren L_1, L_2, L_3 mit

$$(*) \quad [L_i, L_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k$$

Ansatz für S.G.: Suche Darstellung von (*) mit kleinster Dimension.



- $\dim \mathcal{X} = 1$ X
- $\dim \mathcal{X} = 2$ ✓
- $\dim \mathcal{X} = 3$ ✓

Über $\mathcal{X} = \mathbb{C}^2$, definieren Pauli-Matrizen:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

\leadsto Dann erfüllen $L_i = -\frac{i}{2} \sigma_i$ (*).

Spin- $\frac{1}{2}$

Darstellung

4.3.7 Observablen für Spin-1/2-Systeme

Welche Observable misst "mag. Moment in z-Richtung"?

$$A_z = \sum_{\lambda} \lambda P_{\lambda}$$

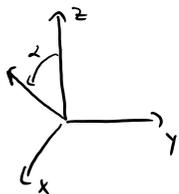
$$\dim \mathcal{H} = 2 \Rightarrow \dim P_{\lambda} = 1 \Rightarrow P_{\lambda} = |\phi_{\lambda}\rangle\langle\phi_{\lambda}|$$

$\Rightarrow \lambda$ kann zwei Werte annehmen. Wähle $\{+1, -1\}$.

$$\Rightarrow A_z = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

Zu den E.V.: Moment in z-Richt. invariant unter z-Drehungen:

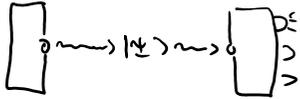
$$\Rightarrow \underbrace{\left(\mathbb{1} + t \frac{i}{2} \sigma_z \right)}_{\begin{bmatrix} 1+t\frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 1-t\frac{i}{2} \end{bmatrix}} |\uparrow\rangle \stackrel{!}{\sim} |\uparrow\rangle \Rightarrow |\uparrow\rangle = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & =: |\uparrow\rangle \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & =: |\downarrow\rangle \end{cases}$$



$$|\uparrow(\alpha)\rangle = e^{i\alpha \frac{1}{2} \sigma_y} |\uparrow\rangle \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

4.4 Postulate: Zeitentwicklung
[Hamiltonsch]

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 Hamilton-Gl. beschrieben:

$$\partial_t \vec{x}(t) = \mathcal{J} \vec{\nabla} H(\vec{x}(t)),$$

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

H Hamilton-Fkt.
 $\hat{=}$ Gesamtenergie.

In der QM postulieren wir:

- ④ Jedem System ist eine Observable H zugeordnet
- der Hamilton-Op. oder Hamiltonian - der Energiemessungen beschreibt.
- ⑤ Die Bewegungsgleichung der QM ist die Schrödingergl.

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

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.)

4.4.1 Zeitentwicklungsoperator und stationäre Schrödingergleichung

Schrödinger-Gl.: $\partial_t |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H |\Psi(t)\rangle$

Def.: Zeitentwicklungsoperator:

$$U(s) : |\Psi(t_0)\rangle \mapsto |\Psi(t_0+s)\rangle$$

\Rightarrow ① $U(0) = \mathbb{1}$ ② $U(s)U(t) = U(s+t)$

\Rightarrow Die $U(s)$ sind Einparametergruppe.

$$\Rightarrow U(s) = e^{\frac{1}{i\hbar} H s}$$

Dies löst formal die Schrödingergl.

Um sie praktisch zu lösen, finde E.W. und E.V. von H :

$$H |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle \quad \text{stationäre Schrödingergl.}$$

$$\Rightarrow U(s) = \exp\left(\frac{s}{i\hbar} \sum_i E_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|\right) = \sum_i e^{\frac{s}{i\hbar} E_i} |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

Entwickel:

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

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

$$\Rightarrow c_i(t) = e^{\frac{t-t_0}{i\hbar} E_i} c_i(t_0)$$

In der Eigenbasis des Hamiltonoperators ist die Zeitentwicklung also sehr einfach: die Entwicklungskoeffizienten werden mit einer komplexen Phase multipliziert, deren Argument linear in der Zeit ist. Die "Winkelgeschwindigkeit" ist dabei die Energie in Einheiten von \hbar .

Nebenbei ergibt sich:

\Rightarrow Da $E_i \in \mathbb{R}$, sind die E.W. von $U(t)$ von der Form $e^{-it \frac{E_i}{\hbar}}$

$\Rightarrow U(t)$ ist unitär.

4.4.2 Bsp.: Larmorpräzession



Hamilton-Op.: $H = -\vec{B} \cdot \vec{S}$

$$= -\gamma \sum_{i=1}^3 B_i S_i$$

$$= -\gamma \sum_{i=1}^3 B_i \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

Also: $\vec{B} = \begin{pmatrix} B \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow H = -\frac{\hbar\gamma}{2} B \sigma_x \quad \cdot |\uparrow(0)\rangle = |\uparrow\rangle.$

Stationäre Schröd.:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \rightsquigarrow \text{E.V.:} \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |\uparrow^x\rangle, \quad \lambda = +1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |\downarrow^x\rangle, \quad \lambda = -1 \end{cases}$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar\gamma}{2} B (|\uparrow^x\rangle\langle\uparrow^x| - |\downarrow^x\rangle\langle\downarrow^x|).$$

Anfangsbed. im H-Eigenbasis

$$|\uparrow(0)\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow^x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow^x\rangle.$$

$$\Rightarrow |\uparrow(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-t \frac{\hbar\gamma}{2\hbar} B} |\uparrow^x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{+t \frac{\hbar\gamma}{2\hbar} B} |\downarrow^x\rangle \dots$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\omega/2 t} |\uparrow^x\rangle + e^{i\omega/2 t} |\downarrow^x\rangle \right)$$

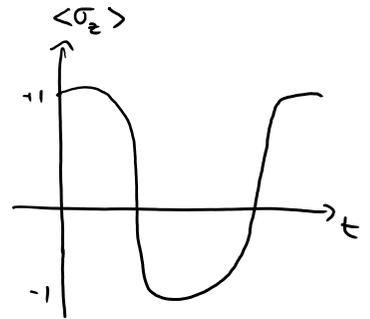
mit $\omega = -\gamma B$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\omega/2 t} + e^{i\omega/2 t} \\ e^{-i\omega/2 t} - e^{i\omega/2 t} \end{pmatrix}$$

Larmor-Frequenz

$$= \begin{pmatrix} \cos(\omega/2 t) \\ i \sin(-\omega/2 t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \sigma_z \rangle_{\psi(t)} &= \langle \psi(t) | \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} | \psi(t) \rangle \\ &= \cos^2(-\omega/2 t) - \sin^2(-\omega/2 t) \\ &= \cos(\omega t) \end{aligned}$$



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

$$\langle \sigma_x \rangle_{\psi(t)} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \langle \sigma_x \rangle \\ \langle \sigma_y \rangle \\ \langle \sigma_z \rangle \end{pmatrix} \hat{=} \begin{array}{c} \text{Blochvektor} \\ \text{Diagram showing a Bloch vector in the } xy\text{-plane, rotating counter-clockwise around the } x\text{-axis. The } z\text{-axis is vertical, } y\text{-axis is horizontal to the right, and } x\text{-axis is diagonal down-left. A red circle indicates the path of the vector in the } xy\text{-plane. Arrows on the circle show the direction of rotation. The } z\text{-axis is labeled } \hat{z}, \text{ the } y\text{-axis is labeled } y, \text{ and the } x\text{-axis is labeled } x. \end{array}$$

Blochvektor

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 Kreiselns im Schwerfeld.

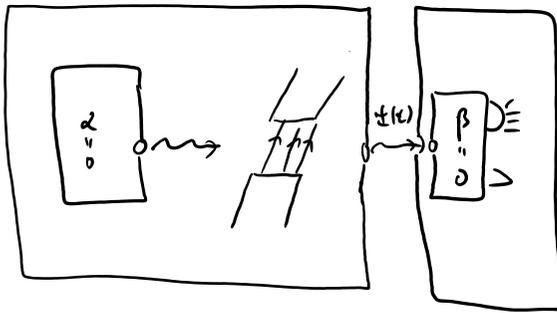
Man mache sich bewusst, dass der Vektor der Spinerwartungswerte Daten enthält, die nicht direkt gleichzeitig messbar sind! Die i -te Komponente sagt, welcher Mittelwert sich ergeben würde, wenn man die i -te Spinrichtung t Zeiteinheiten nach der Präparation wiederholt messen würde. Der Vektor beschreibt 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*.

4.4.3 Das Heisenberg-Bild

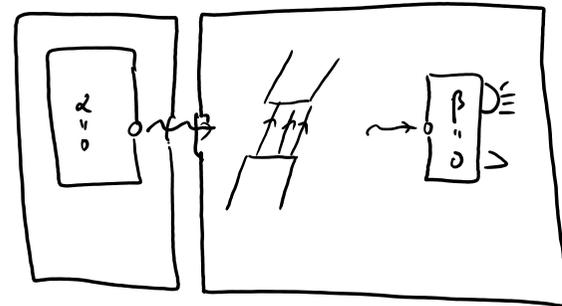
Schrödinger-Bild



$$\langle \psi(t) | \sigma_z | \psi(t) \rangle$$

$$\begin{aligned} & \parallel \\ & \langle \psi(0) | \underbrace{U(t)^\dagger \sigma_z U(t)}_{=: \sigma_z(t)} | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

Heisenberg-Bild



$$\langle \psi(0) | \sigma_z(t) | \psi(0) \rangle$$

=

!

Def.: Für Observabl A , sei $A(t) = U(t)^\dagger A U(t)$.

DGl. für $A(t)$:

$$\boxed{\frac{d}{dt} A(t)} = U^\dagger(t) A \underbrace{\frac{d}{dt} U(t)}_{\frac{1}{i\hbar} U(t) H} + \left(\underbrace{\frac{d}{dt} U^\dagger(t)}_{-\frac{1}{i\hbar} H U^\dagger(t)} \right) A U(t)$$

$$\boxed{= \frac{1}{i\hbar} [A(t), H]}$$

Heisenberg - B. Gl.

Bsp.: Larmor, wie zuvor.

$$\langle \sigma_x \rangle_{\psi(t)} = \langle \sigma_x(t) \rangle_{\psi(0)}$$

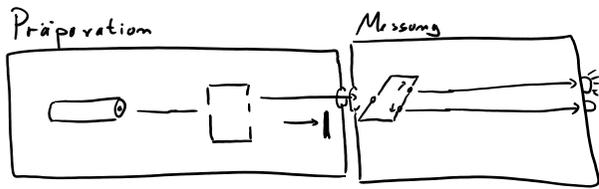
$\psi(t)$

$\psi(0)$

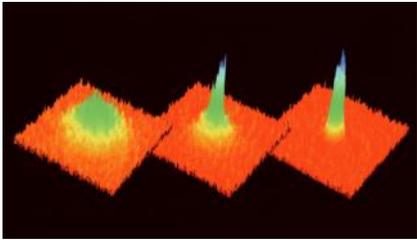
Dafür: $\frac{d}{dt} \sigma_x(t) = \frac{1}{i\hbar} [\sigma_x(t), \dots \sigma_x] = 0.$

$$\Rightarrow \langle \sigma_x \rangle_{\psi(t)} = \text{const.} (= 0).$$

5.1 Kanonische Quantisierung von Teilchen im \mathbb{R}^N



Bislang haben wir uns auf Messungen mit diskreter Ergebnismenge ("spin up", "spin down") befassen.



Die vielleicht natürlichsten physikalischen Systeme sind Teilchen, deren Eigenschaften ("Ort", "Impuls") kontinuierliche Werte annehmen. Hier werden wir ihre quantenmechanische Beschreibung einführen und die Postulate entsprechend erweitern.

Betrachte Teilchen im \mathbb{R}^N , mit Masse m , unter dem Einfluss eines Potentials $V(\vec{x})$.

Die kanonischen Quantisierungsregeln postulieren folgende Beschreibung:

- Hilbertraum: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^N)$.
- Ortsmessungen: Die Wahrscheinlichkeit, System im Zst. $|\psi\rangle$ im Region $I \subset \mathbb{R}^N$ zu finden ist

$$Pr(I) = \int_I |\psi(\vec{x})|^2 d^N \vec{x}.$$

\Rightarrow • $Pr(I)$ definiert Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R}^N , mit Dichte:

$$p(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2 = |\langle \vec{x} | \psi \rangle|^2.$$

\Rightarrow • Erwartungswert der i -ten Ortskoordinate:

$$\int_{\mathbb{R}^N} x_i \rho(\vec{x}) d^N \vec{x} = \int \overline{\psi(\vec{x})} x_i \psi(\vec{x}) d^N \vec{x} = \langle \psi | X_i | \psi \rangle$$

mit

$$(X_i \psi)(\vec{x}) = x_i \psi(\vec{x})$$

der i -te Ortsoperator.

- Impulsmessung: [Wir geben Impulse oft in Einheiten von \hbar an: $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$,
 $\hbar = \text{reduzierte Planckkonst.} \approx 10^{-34} \text{ Js}$]

Betrachte System im Zstd. $|\psi\rangle \in \mathcal{X}$.

Sei $I \subset \mathbb{R}^N$ eine Region im \vec{k} -Raum.

Die Wahrscheinlichkeit, einen Impulswert in $\hbar I$ zu finden, ist:

$$Pr(I) = \int_I |\tilde{\psi}(\vec{k})|^2 d^N \vec{k} \quad \text{mit} \quad \tilde{\psi}(\vec{k}) = (\mathcal{F}\psi)(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \psi \rangle$$

die Fourier-Transf.

\Rightarrow • $Pr(I)$ definiert Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R}^N , mit Dichte:

$$\rho(\vec{k}) = |\tilde{\psi}(\vec{k})|^2 = |\langle \vec{k} | \psi \rangle|^2$$

\Rightarrow • Erwartungswert der i -ten Impulskomponente:

$$\int_{\mathbb{R}^N} \hbar k_i |\tilde{\psi}(\vec{k})|^2 d^N \vec{k} = \langle \psi | \left[\int \hbar \vec{k} |\tilde{\psi}(\vec{k})|^2 d^N \vec{k} \right] | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | P_i | \psi \rangle$$

mit

$$P_i = -i \hbar \frac{d}{dx_i}$$

i -te Impulsoperator.

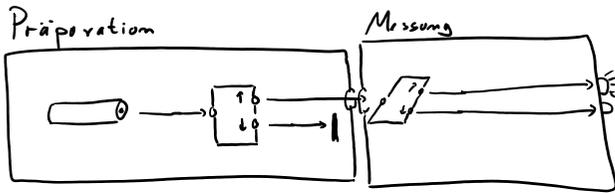
- Energie Der Hamiltonoperator ist

1.1.1 Die der Hamiltonoperator ist

$$H = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + V$$

$$\leadsto (H \psi)(\vec{x}) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{d^2}{dx_i^2} + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}) .$$

5.2 Postulate der QM [allgemeine projektive Messungen, reine Zustände]



Wir verallgemeinern die zuvor eingeführten Postulate, um auch Messungen mit kontinuierlicher Ergebnismenge (wie Ort und Impuls) zuzulassen.

① Jeder Art von quantenmech. System kann ein HR \mathcal{X} zugeordnet werden.

② Messungen [~~diskret~~, projektiv]

Betrachte eine Messvorschrift mit Ergebnismenge $\Lambda \subset \mathbb{R}$.

Jedem Intervall $[a, b]$ ist ein Projektor $P_{[a, b]}$ zugeordnet, mit

- Orthogonalität: $P_{[a, b]} P_{[c, d]} = 0$ wenn $[a, b]$ und $[c, d]$ disjunkt.
- Vollständigkeit:
 - $P_{[a, b]} + P_{[b, c]} = P_{[a, c]}$
 - $P_{[-\infty, \infty]} = \mathbb{1}$.

Bsp: Ortsmessung, $N=1$

$$(P_{[a, b]} \Psi)(x) = \begin{cases} \Psi(x) & x \in [a, b] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

③ Präparationen [reine Zustände]

Einer Anleitung zur Präparation eines Quantensystems ist ein normierter Vektor $|\Psi\rangle \in \mathcal{X}$ zugeordnet.

F_c gilt die Bornsche Regel [~~diskret~~ proj. Messung an reinem Zst.]

Es gilt die Bornsche Regel [~~disk.~~ proj. Messung an reinem Zst.]

- Wahrscheinlichkeit $P_{\Psi}([a,b])$ das Ergebnis $\lambda \in [a,b]$ zu erhalten

$$P_{\Psi}([a,b]) = \text{tr} \left(P_{[a,b]} |\Psi\rangle\langle\Psi| \right)$$

- Direkt nach der Messung ist dem System der Vektor

$$\frac{P_{[a,b]} |\Psi\rangle}{\sqrt{\text{tr} P_{[a,b]} |\Psi\rangle\langle\Psi|}}$$
 zugeordnet.

Observablen und Spektraldarst.

Nehme an, es gibt Familie von Projektoren P_{λ} für $\lambda \in \mathbb{R}$

s.d.

$$P_{[a,b]} = \int P_{\lambda} d\lambda.$$

Bsp.: $P_{\lambda} = |\delta_{\lambda}\rangle\langle\delta_{\lambda}|.$

→ Erhaltete Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\begin{aligned} P_{\Psi}([a,b]) &= \text{tr} P_{[a,b]} |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= \int_a^b \underbrace{\text{tr} P_{\lambda} |\Psi\rangle\langle\Psi|}_{=: p_{\Psi}(\lambda)} d\lambda \\ &= \int_a^b p_{\Psi}(\lambda) d\lambda \end{aligned}$$

→ Erwartungswert:

$$\int \lambda p_{\pm}(\lambda) d\lambda = \text{tr} \left[\underbrace{\int P_{\lambda} \lambda d\lambda}_{\text{Observable}} \right] |\pm\rangle \langle \pm|$$

5.3 Ausblick: Kanonische Quantisierung aus Symmetrien

Die quantenmechanische Beschreibung von Spin-1/2-Systemen haben wir mit Symmetrieüberlegungen gewinnen können. Eine ähnliche Argumentation ist auch für die kanonische Quantisierung möglich - sie ergibt sich aus der Darstellungstheorie der Galileogruppe.

Die Details sind recht aufwendig. Auch wurde historisch zuerst die Beschreibung gefunden, und später erst mit ihren Symmetrien in Verbindung gesetzt (im Gegensatz zur relativistischen Theorie). Daher wird dieser Zugang nur selten in Lehrbüchern behandelt. Wir werden in der Präsenzveranstaltung kurz darüber diskutieren. Eine ausführliche Darstellung finden Sie im Lehrbuch von Ballentine.

5.4 Die Heisenbergsche 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 $|\langle k|\Psi\rangle|^2$, wenn $|\langle x|\Psi\rangle|^2$ vorgegeben ist? Ein Zusammenhang: Die Verteilungen können nicht gleichzeitig "scharf" sein.

Bsp: Scharfe Ortsverteilung

Betrachte Teilchen an Ort $x_0 \in \mathbb{R}$.

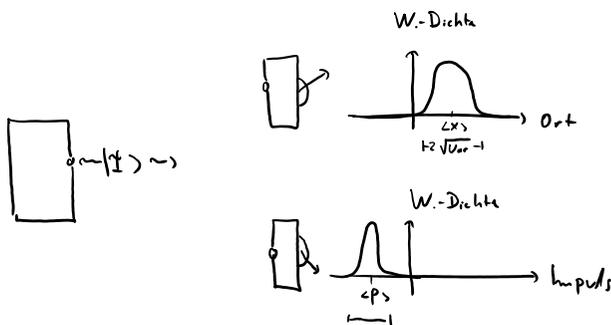
→ QM: $|\Psi\rangle = |x_0\rangle$

Dann ist Fourier-Transformierte:

$$|\langle k|\Psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx} \delta_{x_0}(x) dx \right|^2 = \frac{1}{2\pi}$$

→ Impulsverteilung • nicht normalisierbar. $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} dk = \infty$
 (• über ganz \mathbb{R} gleichverteilt)

Systematisch:



Betrachte Zustand $|\Psi\rangle$.

Wir wollen die Varianz der Ortsverteilung $|\langle x|\Psi\rangle|^2$ durch die Varianz der Impulsverteilung beschränken $|\langle k|\Psi\rangle|^2$.

Vorbereitung: ① Für Observable A ist $\text{Var}_\psi(A) = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$
 $= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

② $[X, P] = i\hbar$

$$((XP - PX)\psi)(x) = \underbrace{x(-i\hbar) \frac{d}{dx} \psi(x)}_{\psi(x) + x \frac{d}{dx} \psi(x)} + i\hbar \frac{d}{dx} (x\psi(x)) = i\hbar \psi(x)$$

Beh.: Für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{X}$ gilt: $\text{Var}_\psi(P) \text{Var}_\psi(X) \geq \frac{\hbar^2}{4}$

Bew.: ① Zentriere:

$$\tilde{X} = X - \langle X \rangle$$

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

② Nutze: $\forall A, \phi : \langle \phi | A^\dagger A | \phi \rangle = \langle A\phi | A\phi \rangle = \|A\phi\|^2 \geq 0$.

Für $\lambda \in \mathbb{R}$, setze

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 \leq \langle \psi | A A^\dagger | \psi \rangle &= \langle \tilde{P}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \tilde{X}^2 \rangle = \langle \tilde{X}^2 \rangle \lambda^2 + \hbar \lambda + \langle \tilde{P}^2 \rangle \\ &\quad + i\lambda \underbrace{\langle \tilde{P} \tilde{X} - \tilde{X} \tilde{P} \rangle}_{-i\lambda [\tilde{X}, \tilde{P}] = \lambda \hbar} \end{aligned}$$

③ Diskriminanten-Trick

(*) ist Polynom in λ , das keine, oder eine

doppelte Nullstelle hat (sonst würde es neg. werden).

(\Rightarrow) Diskriminante $b^2 - 4ac \leq 0$

abc-Formel
 $a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$
bei
 $\lambda_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$
Äq.: Teile durch a
und nutze pq.

(\Rightarrow) $\langle \tilde{X}^2 \rangle \langle \tilde{P}^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$ \square

Anmerkungen, weitere Diskussion in der Präsenzveranstaltung:

Die Mathematik ist leicht, über die Interpretation der Unschärferelation gibt es aber bis heute Debatten. Ein Grund ist, dass die **Beschreibung in Worten** und die **Mathematik** in frühen Veröffentlichungen nicht zusammenpassten.

Die Mathematik sagt, dass man keinen Zustand präparieren kann, dergestalt, dass wenn man viele Messungen entweder des Orts oder des Impuls durchführt, man zwei scharfe Verteilungen erhält.

In Worten wird dazu häufig gesagt, dass eine Ortsmessung den Impuls störe; oder dass gleichzeitige Messung von Ort und Impuls nicht möglich seien; oder dass man einem Teilchen keinen Impuls zuweisen kann, wenn man nur den Ort misst, usw. Alle diese Aussagen sind auch wahr - folgen aber nicht aus der unteren Schranke an das Produkt der Varianzen. Dass diese anderen Interpretationen auch gelten, und wie man sie präzise formuliert, wurde erst in den letzten Jahren sorgfältig beschrieben!

5.5 Eindimensionale Potentialprobleme

Hier studieren wir den Hamilton-Operator

$$H = \frac{P^2}{2m} + V$$

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

numerisch und analytisch.

5.5.1 Freie Teilchen

Teilchen ist "frei" wenn $V(x)=0$.

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Spektraldarstellung (vgl. 3.6.3):

$$P = \int \hbar k |k\rangle \langle k| dk$$

$$\Rightarrow H = \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |k\rangle \langle k| dk$$

Stationäre Schrödingergl. $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

\leadsto gelöst durch $|\phi\rangle = |k\rangle$, $E = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

\leadsto • Spektrum = \mathbb{R}_+

• Jeder Eigenwert zweifach entartet $k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Zeitentwicklung:

$$|\psi(t=0)\rangle = \int |k\rangle \langle k| dk |\psi(0)\rangle = \int |k\rangle \underbrace{\langle k|\psi(0)\rangle}_{\text{Fourier-Transf. } \tilde{\psi}(k, t=0)} dk$$

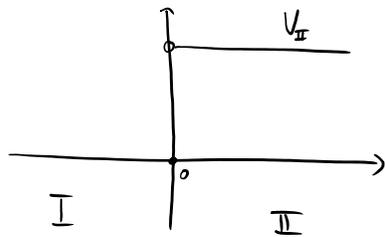
$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{t}{\hbar}H} |\psi(0)\rangle = \int |k\rangle \underbrace{e^{-i\frac{t}{\hbar}E(k)} \langle k|\psi(0)\rangle}_{\tilde{\psi}(k, t)} dk$$

Bsp.: Gaußsches Wellenpaket. -> Hausaufgabe.

Um die Zeitentwicklung eines freien Teilchens zu berechnen, muss man also einfach die Anfangsbedingungen in der Fourier-Basis ausdrücken, und die Fourier-Koeffizienten mit einer zeitabhängigen Phase multiplizieren. Wenn das Ergebnis wieder als Funktion der Ortsvariablen ausgedrückt werden soll, muss zuletzt noch eine inverse Fourier-Transformation angewandt werden.

Prinzipiell ist das ein recht einfaches und explizites Rezept. Es entspricht dem Lösungsansatz gekoppelter harmonischer Oszillatoren in der klassischen Mechanik. Zugegeben: In der Praxis können die Fourierintegrale schon etwas nervig werden - selbst der Fall von Gaußschen Wellenpaketen wird Sie in der Übung eine Woche lang beschäftigen.

5.5.2 Die Potentialstufe

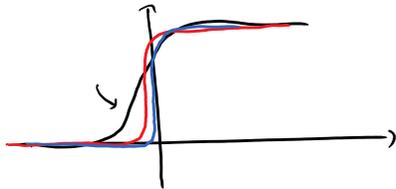


Wir betrachten das stückweise konstante

Potential

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

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

Mit ①, ② können wir Schröd.-Gd. für gegebene Energie E bei I und II getrennt lösen, und dann "anpassen": $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

Bei I: Wie für das freie Teilchen:

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

Bei II: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{II}\right) \phi(x) = E \phi(x) \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) = (E - V_{II}) \phi(x)$

Betrachte den Fall $E < V_{II}$.

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{2m(E - V_{II})}{\hbar^2}} = i \underbrace{\sqrt{\frac{2m(V_{II} - E)}{\hbar^2}}}_{\lambda} \quad \Rightarrow \phi(x) = C e^{\lambda x} + D e^{-\lambda x}$$

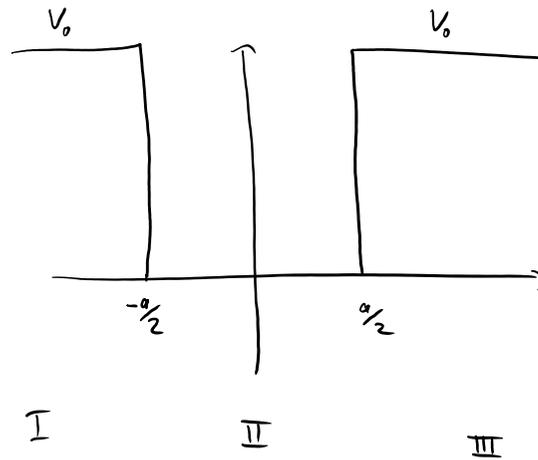
Regularitätsbed.:

$$\textcircled{3} \Rightarrow C = 0$$

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

Mit diesen Techniken können wir die Energiequantisierung im [Kastenpotential](#) nachweisen; und Sie können in der Hausaufgabe den Tunneleffekt als [Streuproblem](#) lösen.

5.5.3 Das Kastenpotential



Wir betrachten Gebiet I der Länge a mit Potential $V=0$.
Aussserhalb des Gebiets ist $V=V_0$.

Nach 5.5.2 dringt die Wellenfunktion etwa $\frac{1}{\lambda} = \sqrt{\frac{k^2}{2m(V_0-E)}}$ weit
nach II / III ein.

Schickt man für beschränktes E

das Potential $V_0 \rightarrow \infty$, erhält man also Lösungen mit

$$\psi(x) = 0, \quad |x| \geq \frac{a}{2}.$$

\leadsto Teilchen ist "im Kasten gebunden".

Dort: $\phi_{II}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} = A' \sin(kx) + B' \cos(kx)$ $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

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

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

$\sin(\pm k a/2) = 0$

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

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

$\cos(\pm k a/2) = 0$

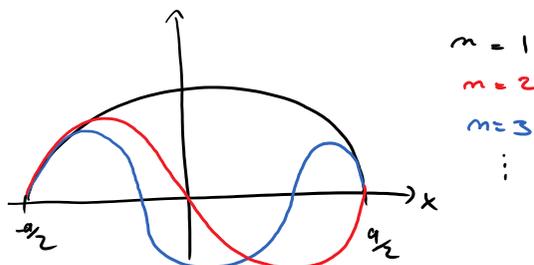
$\Leftrightarrow k \frac{a}{2} = (m' + \frac{1}{2}) \pi \quad m' \in \mathbb{N}$

$\Leftrightarrow k a = \underbrace{(2m' + 1)}_{=: m \text{ ungerade}} \pi$

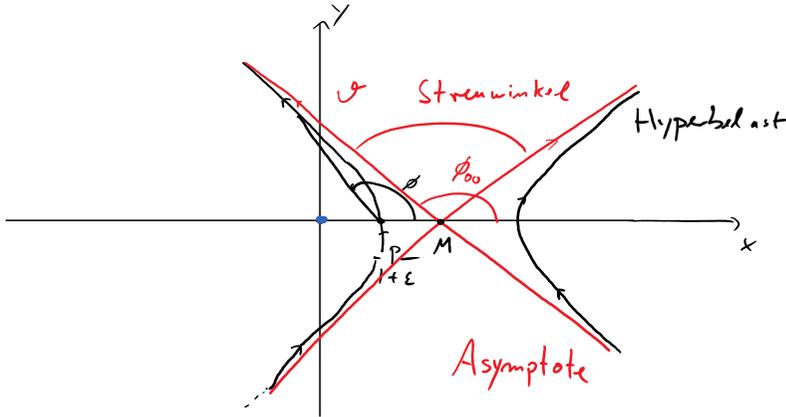
\Downarrow

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

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



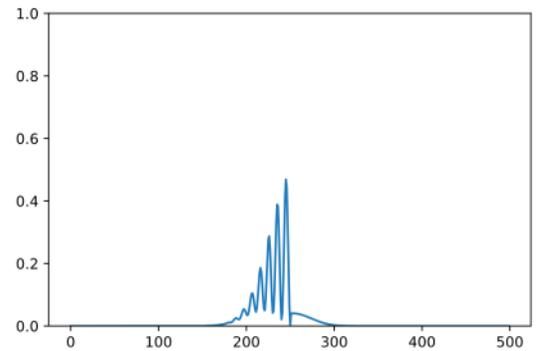
5.5.4 Streutheorie in einer Dimension



Erinnern Sie sich an die Streutheorie in der klassischen Mechanik? Statt die genaue Trajektorie eines Körpers um ein Kraftzentrum auszurechnen, haben wir uns das Leben leicht gemacht, und nur den asymptotischen Streuwinkel berechnet.

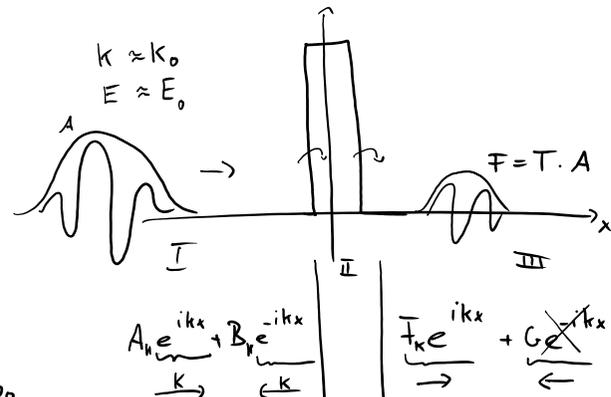
Das geht auch in der Quantenmechanik - und ist dort vielleicht noch wichtiger.

Bsp.: Die Dynamik eines Wellenpakets, das durch eine Potentialbarriere tunnelt ist nicht analytisch beschreibbar. Das asymptotische Verhalten bei $t \rightarrow \pm\infty$ ist hingegen ein Übungszettel.



Das geht so:

1. Im Bereichen mit $V = 0$ entspricht die Schrödingergleichung der des freien Teilchens.
2. Es gibt also "einlaufende", "auslaufende" und "reflektierte" Lösungen. Streutheorie fragt, wie diese Lösungen zusammenhängen.
3. Für stückweise konstantes Potential setzen die Regularitätsbedingungen aus 5.5.2 die Koeffizienten zu einander in Relation.
4. Wenn nun **für alle** Eigenvektoren mit Energie $E \approx E_0$ und $G \rightarrow 0$ gilt, dass $F_{k,1} = T$, dann **muss** eine einlaufende Welle mit Amplitude A für $t \rightarrow +\infty$



4. Wenn nun **für alle** Eigenvektoren mit Energie $E \propto E_0$ und $G=0$ gilt, dass $F_k/A_k = T$, dann **muss** eine einlaufende Welle mit Amplitude A für $t \rightarrow +\infty$ eine auslaufende Komponente mit Amplitude $F = T A$ haben.

$$A_k e^{ikx} + B_k e^{-ikx} \quad \left| \quad \begin{array}{l} \overline{F}_k e^{ikx} + \cancel{G_k e^{-ikx}} \\ \rightarrow \quad \leftarrow \end{array} \right.$$

Wir können so also aus Lösungen der **stationären** Schrödingergleichung (asymptotische) **dynamische** Information ableiten!

5.5.5 Satz von Ehrenfest

Sie haben die Dynamik des freien Teilchens im Schrödingerbild mühsam von Hand ausgerechnet.

Hier werden wir sehen, dass wenn wir uns nicht für die volle zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(x, t)$ interessieren, sondern nur für die Zeitentwicklung ausgewählter Erwartungswerte - z.B. $\langle X \rangle(t)$ - dann kann man im [Heisenbergbild](#) mit viel weniger Arbeit allgemeinere Resultate erzielen.

Nebenbei erhalten wir eine wichtige Inkarnation des Korespondenzprinzips, das sagt, dass die klassische Mechanik aus der QM folgen muss.

Technische Vorbereitung:

"Kommutator mit X nehmen" agiert auf Polynomen in P "wie eine Ableitung".

Genauer:

Beh.: $\forall m: [X, P^m] = i\hbar m P^{m-1}$

Bew.: Induktion über m :

• $m=0$ ✓

• $m \rightarrow m+1$:

$$[X, P^{m+1}] = X P^{m+1} - P^{m+1} X$$

$$= X P^m P - P P^m X$$

$$= (X P^m P - P^m X P) + (P^m X P - P^m P X)$$

$$= [X, P^m] P + P^m [X, P]$$

$$= i\hbar m P^{m-1} P + P^m i\hbar$$

$$= i\hbar (m+1) P^m$$

$$= i\hbar(m+1)P^m$$

□

Ähnlich: $[X^m, P] = i\hbar m X^{m-1}$, $[f(X), P] = i\hbar f'(X)$.

Damit: Satz von Ehrenfest

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X \rangle(t) &= \langle \psi(0) | \frac{d}{dt} X(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | \frac{1}{i\hbar} [X, \frac{1}{2m} P^2 + V] | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{m} \langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{m} \langle P \rangle(t) \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, \frac{1}{2m} P^2 + V(X)] \rangle(t) = - \langle V'(X) \rangle(t) \stackrel{(S)}{=} V'(\langle X \rangle(t))$$

Wenn V ein Polynom vom Grad ≤ 2 ist, ist V' linear

$$\Rightarrow \langle V'(X) \rangle = V'(\langle X \rangle) \quad (S)$$

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

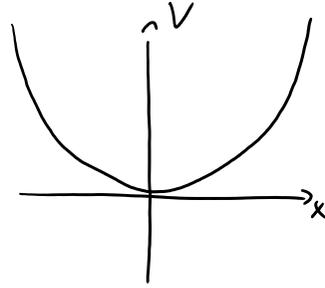
Ehrenfest

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).

6.1 Der harmonische Oszillator

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

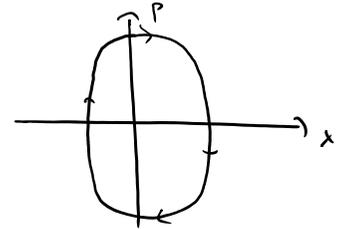


Hamiltonfunktion hat Form

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

Lösung:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{m\omega^2 E}} \cos(\omega t + \varphi) \\ \sqrt{2mE} \sin(\omega t + \varphi) \end{pmatrix}$$



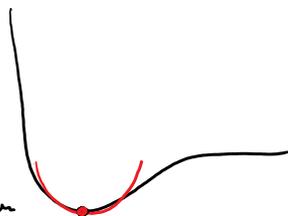
Wichtigstes Modellsystem der Physik!

Gründe:

- (Physik): Näher 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.

6.2 Algebraische Lösung

Bisherige 1D Potentialprobleme haben wir behandelt, indem wir direkt die Differentialgleichungen 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.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{1}{2} m \omega^2 \psi = E \psi$$

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.

Das Programm ist überaus erfolgreich! Die Lösung der stationären Schrödingergleichung, sowie viele 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.

6.2.1 Erzeuger, Vernichter, Besetzungszahloperator

Ziel: Löse stat. Schrödinger-Gl. für

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

① Wähle angepasste Einheiten

Setze:

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

Damit:

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

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

② Wichtiger Trick - Leiteroperatoren.

Def.:

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

Damit:

$$\textcircled{1} \quad [a, a^\dagger] = \frac{-i}{2} [\hat{X}, \hat{P}] + \frac{i}{2} [\tilde{P}, \tilde{X}] = \underline{1}$$

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

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

Setze

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

Es genügt, EW-Gl. für N zu lösen:

$$N|\phi_m\rangle = m|\phi_m\rangle \quad \Rightarrow \quad H|\phi_m\rangle = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) |\phi_m\rangle = \hbar\omega \left(m + \frac{1}{2} \right) |\phi_m\rangle$$

6.2.2 Eigenwerte des Besetzungszahloperators durch Leitern

III a) Alle E.W. von N sind ≥ 0 .

b) $N|\phi\rangle = 0 \Leftrightarrow a|\phi\rangle = 0$.

Bew.: Sei $|\phi\rangle$ normierter E.V. von N zum E.W. m .

$\Rightarrow m = \underbrace{m}_{=1} \langle \phi | \phi \rangle = \langle \phi | N | \phi \rangle = \langle \phi | a^\dagger a | \phi \rangle - \langle a \phi | a \phi \rangle = \|a|\phi\rangle\|^2 \geq 0. \quad \square$

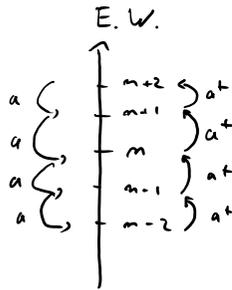
IV [Super-wichtiger Trick!!! "Leitern"]

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

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

a)

b) Wenn $m \neq 0 \Rightarrow a|\phi\rangle$ " " " $(m-1)$



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

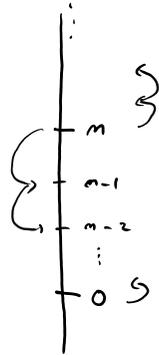
$\cdot N(a|\phi\rangle) = (aN - a)|\phi\rangle = (m-1)(a|\phi\rangle)$

$\cdot \|a|\phi\rangle\|^2 = \langle \phi | a^\dagger a | \phi \rangle = m$.

(a) analog.

□

⑤ Die Eigenwerte von N sind $\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$



Bew.: Sei m ein E.W. von N . Durch "Absteigen" erhält man

Seq. von E.W. $m, m-1, m-2, \dots$ die abbricht \Leftrightarrow wenn man 0 erreicht. Da alle E.W. ≥ 0 sind, muß 0 vorkommen.

\Rightarrow

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

6.2.3 Keine Entartung

Für den eindimensionalen harmonische Oszillator gilt:

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

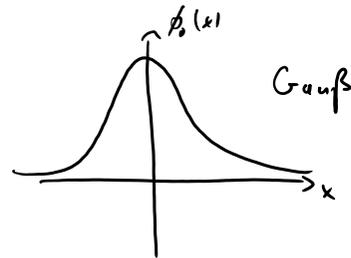
Bew.: (Einzigster Schritt, der konkrete Darstellung braucht!)

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

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

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

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



(VII) Alle Eigenräume sind nicht-entartet.

Bew.: Widerspruchsbeweis. Nehme an, n ist entartet.

$\Leftrightarrow \exists |\phi_n\rangle, |\psi_n\rangle$ s.d.

- $\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 0$,
- $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$,
- $N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$.

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

setze $|\phi_{n-1}\rangle = a|\phi_n\rangle$, $|\psi_{n-1}\rangle = a|\psi_n\rangle$.

$N|\phi_{n-1}\rangle = (n-1)|\phi_{n-1}\rangle$, $N|\psi_{n-1}\rangle = (n-1)|\psi_{n-1}\rangle$.

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

Nach (IV) sind beide E.V. zu $m-1$. Aber:

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

Per Induktion folgt, dass auch $m=0$ entartet ist

\leadsto Widerspruch.

□

6.2.4 Eigenbasis des 1-D Oszillators

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

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

die anderen E.V. erhalten wir durch Leitem.

$$\text{Dazu: } \|a^+|m-1\rangle\|^2 = \langle m-1| \underbrace{a^+ a^+}_{a^+ a + 1} |m-1\rangle = m-1 + 1 = m.$$

$$\Rightarrow a^+ |m-1\rangle = \sqrt{m} |m\rangle$$

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

$$\Rightarrow \begin{array}{c} \vdots \\ \frac{a}{\sqrt{3}} \left(\begin{array}{c} |3\rangle \\ |2\rangle \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \uparrow \\ \uparrow \end{array} \right\} \frac{a^+}{\sqrt{3}} \\ \frac{a}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} |1\rangle \\ |0\rangle \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \uparrow \\ \uparrow \end{array} \right\} \frac{a^+}{\sqrt{2}} \\ \frac{a}{\sqrt{1}} \left(\begin{array}{c} |0\rangle \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \uparrow \end{array} \right\} \frac{a^+}{\sqrt{1}} \end{array}$$

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

6.2.5 Erwartungswerte in Eigenzuständen

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:

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

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

\Rightarrow Orts- und Impulsverteilung von Eigenzuständen ist symmetrisch.

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

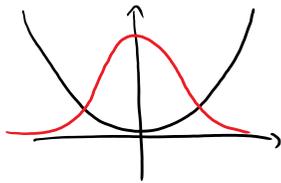
$$\Rightarrow \text{Var}_{|m\rangle}(\tilde{X}) = m + \frac{1}{2} \quad (= \text{Var}_{|m\rangle}(\tilde{P}), \text{ analog}).$$

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 ($n=0$) des harmonischen Oszillators minimiert Heisenbergsche Unschärferelation!



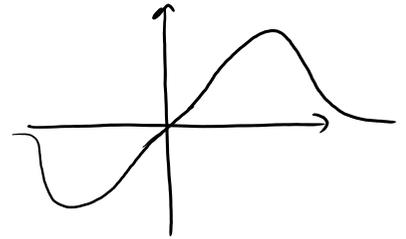
\hookrightarrow Das ist intuitiv: Um $\langle V(X) \rangle$ zu minimieren, muss $|\phi_0(x)|^2$ bei kleinen x konzentriert sein. Aber in $H = \frac{1}{2}m\omega^2(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2)$ gehen Ort- und Impuls symmetrisch ein.
 $\Rightarrow |\tilde{\phi}_0(p)|$ muss ebenfalls um $p=0$ konz. sein.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

6.2.6 Ortsdarstellung

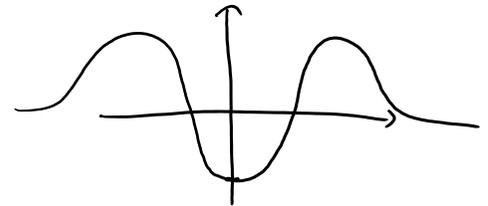
(für $m = \omega = \hbar = 1 \dots$):

$$\langle x|0\rangle = \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

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

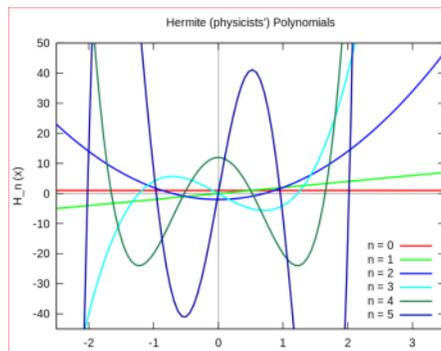


$$\begin{aligned} \langle x|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x|a^+|1\rangle = \frac{1}{2 \pi^{1/4}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) 2x e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &= \frac{1}{2 \pi^{1/4}} (2x^2 - 2 + 2x^2) e^{-\frac{1}{2}x^2} \end{aligned}$$



$$\langle x | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \left[x - \frac{d}{dx} \right]^n e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

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



Quelle: Wikipedia, Hermite Polynomials, 5/19.

6.2.7 Zusammenfassung

Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

Angepasste Einheiten

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

Erzeuger, Vernichter

Def.:

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

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

$$\Leftrightarrow \tilde{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+),$$

$$\tilde{P} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (a - a^+)$$

$$\bullet [a, a^+] = \underline{1}$$

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

Spektrum, Eigenzustände:

$$H |m\rangle = E_m |m\rangle$$

$$E_m = \hbar\omega \left(m + \frac{1}{2} \right), \quad m \in \mathbb{N}_0$$

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

Die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind also:

- quantisiert
- äquidistant, mit Abstand $\hbar\omega$
- Grundzustandsenergie ist $\frac{1}{2}\hbar\omega$

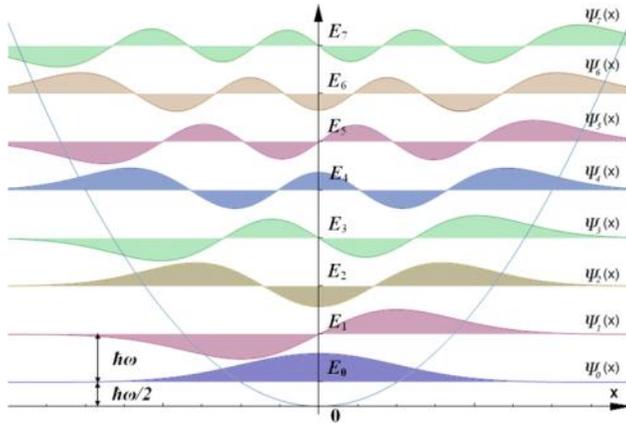
Die Wellenfunktion des Grundzustands ist

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

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (\hbar = \omega = m = 1)$$

- Grundzustandsenergie ist $\frac{1}{2} \hbar \omega$

Die Wellenfunktion des Grundzustands ist eine Gaußfunktion. Höhere Eigenzustände erhält man durch Anwendung der Leiteroperatoren. Es ergeben sich Hermite-Polynome.



Quelle: [Wikipedia](#), public domain.

6.3 Kohärente Zustände

Hausaufgabe.

6.4 Mehrdimensionale Oszillatoren

N FHG

$$\leadsto \mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^N)$$

$$\cdot H = \sum_{i=1}^N \underbrace{\left(\frac{1}{2m_i} P_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 X_i^2 \right)}_{H_i} = \sum_i H_i$$

$$\cdot P_i \psi(\vec{x}) = (-i\hbar \frac{d}{dx_i}) \psi(\vec{x}), \quad X_i \psi(\vec{x}) = x_i \psi(\vec{x})$$

$$\Rightarrow [X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow [H_i, H_j] = 0$$

Statt nur $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$, fordern stärker:

$$\begin{array}{l} N \\ \text{gleichzeitige} \\ \text{E.W.-G.l.} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} H_1 |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle = E_1(m_1) |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle \\ \vdots \\ H_N |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle = E_N(m_N) |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle \end{array} \right.$$

Produktansatz

$$\phi_{m_1, \dots, m_N}(\vec{x}) = \underbrace{\phi_{m_1}(x_1) \dots \phi_{m_N}(x_N)}$$

E.F. des 1-D harmonischen Osz. H_i .

$$\begin{aligned}
\Rightarrow H_1 \phi_{m_1, \dots, m_N}(\vec{x}) &= (H_1 \phi_{m_1}(x_1)) \phi_{m_2}(x_2) \dots \\
&= (E_1(m_1) \phi_{m_1}(x_1)) \phi_{m_2}(x_2) \dots \\
&= E_1(m_1) \phi_{m_1, \dots, m_N}(\vec{x}) \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Leicht zu sehen: Dies ist vollständige Satz von E.F.

$\leadsto \{ \phi_{m_1, \dots, m_N} \}_{m_1=0, m_2=0, \dots}^{\infty}$ ist ONB für $L^2(\mathbb{R}^N)$.

$$\begin{aligned}
\Rightarrow H |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle &= \left(\sum_{i=1}^N H_i \right) |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle \\
&= \left(\underbrace{\sum_i E_i(m_i)}_{\sum_i \hbar \omega_i (m_i + \frac{1}{2})} \right) |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle
\end{aligned}$$

$\leadsto H$ ist i.d.R. entartet!

• Man setzt oft:

• $|m_1, \dots, m_N\rangle := |\phi_{m_1, \dots, m_N}\rangle$

• $|0\rangle := |vac\rangle = |0, \dots, 0\rangle$

• $a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X}_i - i \tilde{P}_i)$

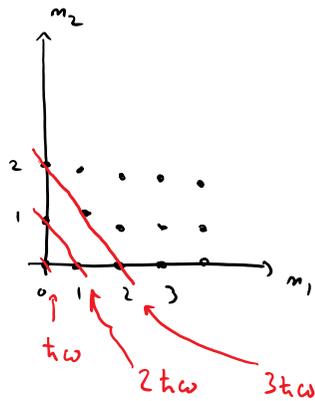
$|0\rangle \neq x \mapsto 0$
 $|\phi_0\rangle \hat{=} \pi^{-N/4} e^{-\frac{i}{2} \|x\|^2}$

$$\Rightarrow |m_1, \dots, m_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_1! \dots m_N!}} (a_1^\dagger)^{m_1} \dots (a_N^\dagger)^{m_N} |vac\rangle$$

Bsp.: • isotropes harm. Os2.

$$m_i = m, \quad \omega_i = \omega.$$

$$\underline{N=2}$$



• N beliebig, $m = \omega = \hbar = 1$.

$$\begin{aligned} \phi_0(\vec{x}) &= \phi_{vac}(\vec{x}) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}x_1^2} \dots \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}x_N^2} \\ &= \pi^{-N/4} e^{-\frac{1}{2}\|\vec{x}\|^2} \end{aligned}$$

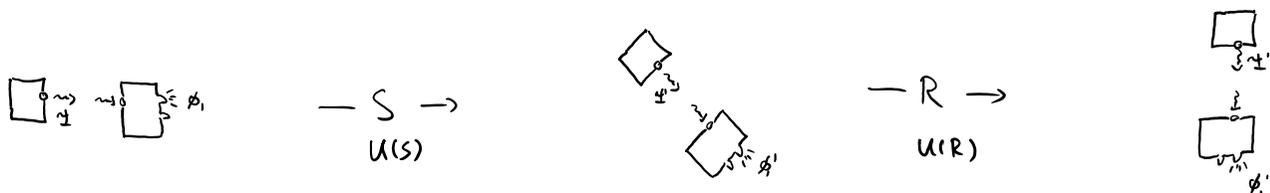
6.5 Ausblick: Gekoppelte Oszillatoren

7.1 Drehimpuls: Wiederholung der Hintergründe

1. Betrachte Rotation R . Mit R ist eine unitäre Abbildung

$$U(R) : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U(R) |\psi\rangle$$

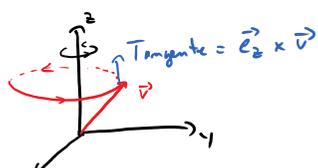
verbunden, die Zustände auf rotierte Zustände abbildet.



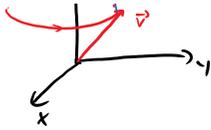
2. Verknüpfung von Rotationen entspricht Multiplikation der Unitären, bis auf eine mögliche globale Phase.

$$U(R)U(S) = U(RS) e^{i\phi(R,S)}$$

3. Zu erster Ordnung werden Drehungen durch Erzeugende beschrieben.



$$R_{z,t} = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ +\sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbb{1} + t \overbrace{\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}^{\text{Erzeugende}} + O(t^2)$$



$$R_{z,t} = \begin{bmatrix} +\sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbb{1} + t \begin{bmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + O(t^2)$$

"infinitesimale Drehung"

$$\frac{d}{dt} \Big|_0 R_{\vec{\omega},t} \vec{v} = \vec{\omega} \times \vec{v} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{bmatrix}}_{\text{Erzeugende } \Gamma_{\vec{\omega}}} \vec{v}$$

Basis:

$$\Gamma_x = \Gamma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Gamma_y = \Gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Gamma_z = \Gamma_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

4. Baker-Campbell-Hausdorff: Verknüpfung von Gruppenelementen \approx Kommutatoren von Erzeugenden

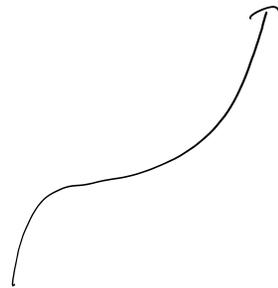
$$R \cdot S = e^{\Gamma} e^S = e^{\Gamma+S+\frac{1}{2}[\Gamma,S]+\dots}$$

5. Kommutatorrelation der Erzeugenden der Drehgruppe gegeben durch

$$[r_i, r_j] = \sum_k \varepsilon_{ijk} r_k, \quad [r_x, r_y] = r_z \quad + \text{zyklisch.}$$

6. Nach Punkt 2 muss dies ebenso für die Erzeugenden der unitären Darstellung gelten

$$U(e^{r_i}) = e^{L_i} \Rightarrow [L_i, L_j] = \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \quad (*)$$



Ziel nun: Beschreibe alle Möglichkeiten, diese Gleichung zu erfüllen.

Bsp.:

- | | | | |
|---|------------------------------------|------------------------------------|-----------------------|
| ① | $\mathcal{X} = \mathbb{C}^1,$ | $L_i = 0$ | triviale Darstellung |
| ② | $\mathcal{X} = \mathbb{C}^2,$ | $L_i = -\frac{i}{2} \sigma_i$ | Spin $-\frac{1}{2}$ " |
| ③ | $\mathcal{X} = \mathbb{C}^3,$ | $L_i = r_i$ | definiierende " |
| | \vdots | \vdots | |
| ④ | $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^3),$ | $L_i = (\vec{X} \times \vec{P})_i$ | Bahndrehimpuls |

7.2 Drehimpulsoperatoren

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. $\left(\frac{1}{i\hbar} L_i\right)$ erfüllen die Kommut.-Relationen der Erzeugenden der Drehgruppe.

Bew.:
$$\left[\left(\frac{1}{i\hbar} L_x\right), \left(\frac{1}{i\hbar} L_y\right)\right] = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 [L_x, L_y] = \left(\frac{1}{i\hbar} L_z\right).$$

Anmerkung:

Die *quantenmechanischen Observablen* unterscheiden sich von den *geometrischen Erzeugenden* also durch einen Faktor von $i\hbar$. Die Existenz von zwei Normierungen spiegelt die Tatsache wieder, dass Observablen in der QM sowohl Messungen beschreiben, wie auch Symmetrien erzeugen. Die beiden Rollen erfordern unterschiedliche Normalisierungen. Sie kennen das bereits von der Schrödingergleichung: Die Erzeugende der Zeitentwicklung ist $\frac{1}{i\hbar}H$, unterscheidet sich von der Observable, die der Energie entspricht also durch den gleichen Vorfaktor.

Wir werden von nun an mit Observablen und der entsprechenden Normalisierung arbeiten.

7.2.1 Magnetische und Drehimpulsquantenzahl

Ausgangspunkt: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (*)

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

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

Definieren

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad \text{"Quadrat des Drehimpulses"}$$

" 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 L_x, L_y, L_z .

Bew.: (leicht, aber ein wenig nervig) \rightarrow Übung □

Anmerkung: Ein Polynom in den Erzeugern, das mit allen Erzeugern kommutiert heißt Casimir-Operator. Der Drehimpulsbetragsoperator ist nur ein Spezialfall einer sehr allgemeinen Konstruktion, mit der man Casimir-Operatoren für kontinuierliche Gruppen konstruieren kann. Ihnen wird diese Idee gelegentlich wieder begegnen.

Kommut. Operatoren können gleichzeitig diag. werden; besitzen also gemeinsame Eigenbasis. Wir nutzen dies für das Paar L^2, L_z .

(Die z-Richtung ist im Allg. nicht physikalisch ausgezeichnet. Wir könnten die Analyse ebenso mit L_x, L_y oder beliebigem $L_{\vec{w}}$ durchführen \rightarrow das Endergebnis wäre das gleiche).

Sei nun $|\phi\rangle$ ein gemeinsamer E.V. von L^2, L_z .

Die Eigenwerte von L_z heißen magnetische Quantenzahl und werden üblich mit $m\hbar$ bezeichnet

$$L_z |\phi\rangle = m\hbar |\phi\rangle$$

Da $L^2 = \sum_n L_n^2$ eine Summe von Quadraten hermitescher Op. ist sind alle E.W. nicht-negative Zahlen in Einheiten von \hbar^2 :

$$L^2 |\phi\rangle = \lambda^2 \hbar^2 |\phi\rangle$$

Üblicherweise setzt man $l = \sqrt{\lambda^2 + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$ (Grund: später)

$$l(l+1) = \left(\sqrt{\lambda^2 + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}\right) \left(\sqrt{\lambda^2 + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right) = \lambda^2 + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = \lambda^2$$

$$\rightarrow L^2 |\phi\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\phi\rangle$$

$$\leadsto L^2 |\phi\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\phi\rangle$$

↑ Drehimpuls quantenzahl

\leadsto ONB von \mathcal{H} :

$$\left\{ |k, l, m\rangle \right\}_{k,l,m}$$

↑ ↑
Entartung magn. QZ

7.2.2 Magnetische QZ durch Leitern

Ausgangspunkt:

- $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$
- ONB von \mathcal{H} : $\{ |k, l, m\rangle \}_{k, l, m}$
- $L^2 |k, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |k, l, m\rangle$
- $L_z |k, l, m\rangle = m\hbar |k, l, m\rangle$

Ausatz: generiere neue E.V. durch Leitern (vgl. harmon. Osz.)

Dazu:

Def.:

$$L_+ := L_x + i L_y$$

$$\leadsto L_- := L_+^\dagger = L_x - i L_y$$

Übung:

$$\textcircled{1} [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

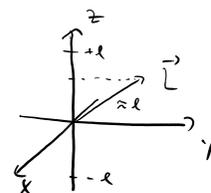
$$\textcircled{2} L_- L_+ = L^2 - L_z(L_z + \hbar)$$

\textcircled{I}

Es gilt: $\textcircled{a} -l \leq m \leq l$

$$\textcircled{b} m = l \Leftrightarrow L_+ |k, l, m\rangle = 0$$

$$m = -l \Leftrightarrow L_- |k, l, m\rangle = 0$$



Bew.: $0 \leq \|L_+ |k l m\rangle\|^2 / \hbar^2 = \langle k l m | L_- L_+ |k l m\rangle / \hbar^2$
 $= \langle k l m | L^2 - L_z (L_z + \hbar) |k l m\rangle / \hbar^2$
 $= l(l+1) - m(m+1)$

Rest des Bew. ist analog. □

II

Wenn $m < l \Rightarrow L_+ |k l m\rangle$ ist L_z -E.V. mit E.W. $\hbar(m+1)$
 " $m > -l \Rightarrow L_- |k l m\rangle$ " " " " " $\hbar(m-1)$

Bew.: $L_z (L_+ |k l m\rangle) = (L_+ \hbar + L_+ L_z) |k l m\rangle$

$$\left[\begin{array}{l} [L_z, L_{\pm}] = \pm L_{\pm} \hbar \\ \Leftrightarrow L_z L_{\pm} = L_{\pm} \hbar + L_{\pm} L_z \end{array} \right] = (L_+ \hbar + L_+ \hbar m) |k l m\rangle = \hbar(m+1) (L_+ |k l m\rangle)$$

□

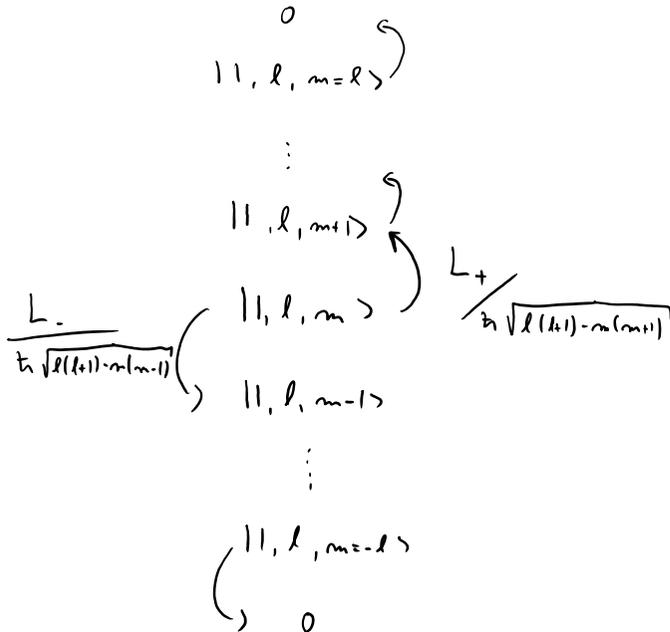
7.2.3 Drehimpulsquantenzahl

Ausgangspunkt:

- ONB von \mathcal{H} : $\{ |k, l, m\rangle \}_{k, l, -l \leq m \leq l}$
- $L^2 |k, l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |k, l, m\rangle$
- $L_z |k, l, m\rangle = m \hbar |k, l, m\rangle$
- $L_{\pm} := L_x \pm i L_y$
- $\|L_{\pm} |k, l, m\rangle\|_{\hbar^2}^2 = l(l+1) - m(m \pm 1)$

Eigenbasis

- Starte mit $|k=1, l, m\rangle$ beliebiger E.V. von L_z, L^2 .



$$L^2(L_{\pm} |k, l, m\rangle) = \hbar^2 l(l+1) (L_{\pm} |k, l, m\rangle)$$

- $m = \pm l$ nass auftreten $\rightarrow 2l+1$ Vektoren entstehen auf diese Art.

\Rightarrow $l \in \frac{1}{2} \mathbb{N}_0$ Quantisierung des Drehimpuls

• Setze $\mathcal{H}_{(l,l)} := \langle \{ |l, l, m\rangle \}_{m=-l}^l \rangle \subset \mathcal{H}$

• Wähle neuen E.V. $|k', l', m'\rangle$ von L^2, L_z , orthogonal zu $\mathcal{H}_{(l,l)}$.

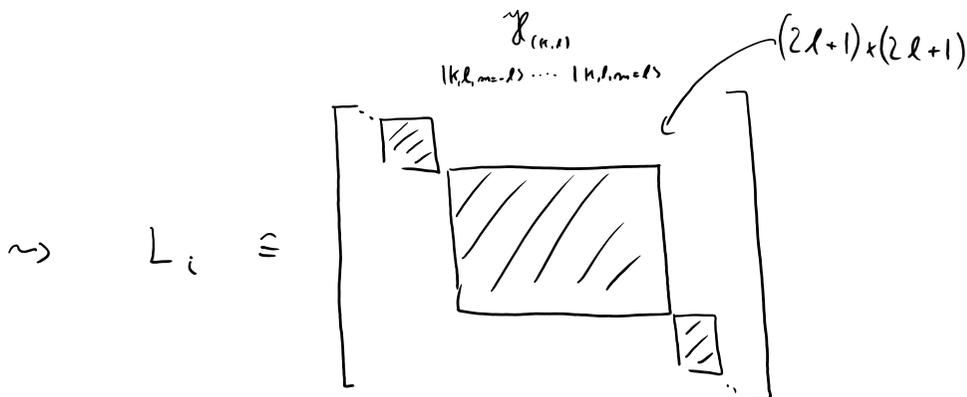
→ Definiere $\mathcal{H}_{(k', l')}$ durch Leitern ausgehend von $|k', l', m'\rangle$

→ Setze iterativ fort. → ONB für ganze \mathcal{H} .

Im dieser Basis:

$$\bullet \langle k' l' m' | L_z | k l m \rangle = \delta_{k'k} \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad m \neq k$$

$$\bullet \langle k' l' m' | L_{\pm} | k l m \rangle = \delta_{k'k} \delta_{l'l} \delta_{m', m \pm 1} \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}$$



Insgesamt:

- Drehimpulsoperatoren können auf Blockdiagonalgestalt gebracht werden.
- Mit jedem Block ist eine Drehimpulsquantenzahl l verbunden.
- Bis auf Basiswahl hängt die Lösung also nur davon ab, welche Drehimpulsquantenzahlen wie häufig vorkommen.
- Die Blöcke mit Drehimpulsquantenzahl l können als elementare Bausteine betrachtet werden, aus denen alle quantenmechanischen Drehimpulse zusammengesetzt sind. (Mathematisch nennt man das eine *irreduzible Darstellung*).

7.2.4 Beispiel: Spin-1/2-Darstellung

Ausgangspunkt:

- $$L_{\pm} := L_x \pm i L_y$$
- $$\langle k'l'm' | L_z | klm \rangle = \delta_{k'k} \delta_{l'l} \delta_{m'm} \hbar m$$
- $$\langle k'l'm' | L_{\pm} | klm \rangle = \delta_{k'k} \delta_{l'l} \delta_{m',m\pm 1} \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}$$

Beispiel: $l = \frac{1}{2} \Rightarrow \mathcal{H} = \langle \{ |k=1, l=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}\rangle, |1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \} \rangle$
 $= \langle \{ | \frac{1}{2} \rangle, | -\frac{1}{2} \rangle \} \rangle$

$\Rightarrow \bullet L_z \cong \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$

• $L_+ \cong \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \hbar \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow L_- = L_+^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) \cong \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$

$L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-) \dots \dots = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$

7.3 Bahndrehimpuls

Vektorielle Orts- und Impulsoperatoren auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\vec{R} := \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}, \quad (\vec{R} \psi)(x, y, z) = \begin{pmatrix} x \psi(x, y, z) \\ y \psi(x, y, z) \\ z \psi(x, y, z) \end{pmatrix}$$

$$\vec{P} := -i\hbar \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}.$$

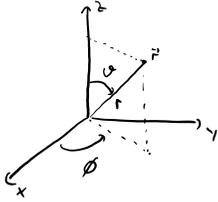
→ Bahndrehimpulsoperator

$$\vec{L} := \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \vec{R} \times \vec{P} = -i\hbar \begin{pmatrix} y\partial_z - z\partial_y \\ z\partial_x - x\partial_z \\ x\partial_y - y\partial_x \end{pmatrix}$$

→ $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ und zyklisch ... tatsächlich ein QM-Drehimpuls!

7.3.1 Reduktion auf Funktionen auf der Sphäre

Hausaufgabe:



$$L_x = -i\hbar (y\partial_z - z\partial_y) = i\hbar \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \right)$$

$$L_y = -i\hbar (z\partial_x - x\partial_z) = i\hbar \left(-\cos\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\theta}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \right)$$

$$L_z = -i\hbar (x\partial_y - y\partial_x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Hängt nicht von r ab!

Geometrisch

Drehungen $(U_R \psi)(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$

erhalten den Radius.

→ Wirken auf quadrat-integrablen Fkt.

und der Einheitskugel:

$$L^2(S^2) = \left\{ \psi(\vartheta, \phi) \mid \int |\psi(\vartheta, \phi)|^2 \sin\vartheta d\vartheta d\phi < \infty \right\}$$

Analytisch

Zur Lsg. der DGL

$$L^2 \psi_{lm}(r, \vartheta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}(r, \vartheta, \phi)$$

$$L_z \psi_{lm}(r, \vartheta, \phi) = \hbar m \psi_{lm}(r, \vartheta, \phi)$$

wähle Produktansatz $\psi_{lm}(r, \vartheta, \phi) = \underbrace{f(r)}_{\text{beliebig}} Y_{lm}(\vartheta, \phi)$

Arbeite ab jetzt auf Einheitskugel.

7.3.3 Kugelflächenfunktionen

Ausgangspunkt:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \sigma} + i \cot \sigma \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\left[L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} + \frac{1}{\tan \sigma} \frac{\partial}{\partial \sigma} + \frac{1}{\sin^2 \sigma} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right]$$

Löse EW-Gl.:

$$\begin{cases} L^2 Y_{\ell m}(\sigma, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\sigma, \phi) \\ L_z Y_{\ell m}(\sigma, \phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\sigma, \phi) \end{cases}$$

$$\textcircled{\text{I}} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell m}(\sigma, \phi) \stackrel{!}{=} \hbar m Y_{\ell m}(\sigma, \phi)$$

$$\Rightarrow Y_{\ell m}(\sigma, \phi) = e^{i\phi m} F_{\ell m}(\sigma) \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z}, \text{ da } \phi + 2\pi \hat{=} \phi$$

\Rightarrow keine halbzahligen Drehimpuls-Q.Z. kommen vor.

$$\textcircled{\text{II}} \quad 0 \stackrel{!}{=} L_+ Y_{\ell \ell}(\sigma, \phi)$$

$$\left[L_+ = \hbar e^{+i\phi} \left(+ \frac{\partial}{\partial \sigma} + i \cot \sigma \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right]$$

$$\Leftrightarrow 0 = \left(\frac{\partial}{\partial \sigma} + i \cot \sigma \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i\ell\phi} F_{\ell \ell}(\sigma)$$

$$\Rightarrow 0 = \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - l \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \right) F_{\text{ker}}(\vartheta)$$

Gewöhnliche Dgl. 1. Ordnung. \leadsto Eindeutige Lsg. \leadsto keine Entartung!

Note: $F_{l,l}(\vartheta) = (\sin \vartheta)^l$

$$\leadsto l (\sin \vartheta)^{l-1} \cos \vartheta - l \cos \vartheta (\sin \vartheta)^{l-1} = 0 \checkmark \leadsto \text{Für jedes } \underline{l \in \mathbb{N}_0} \text{ existiert Lsg. } \ddot{\text{!}}$$

\Rightarrow Auf dem H.R. $L^2(S^2)$ der Fkt. auf der Einheitskugel gibt es O.N.B.

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad \text{mit} \quad l \in \mathbb{N}_0, \quad m = -l, \dots, l$$

Dies sind die Kugelflächenfkt.

Drehungen lassen die Unterräume $\mathcal{X}_l = \langle \{ Y_l^m \}_{m=-l}^l \rangle$ invariant.

Funktionen im \mathcal{X}_l mit

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

heißen

$$s\text{-} p\text{-} d\text{-} f\text{-}$$

- Orbitale

Expliziter:

Rechnung oben: $Y_\ell^m(\vartheta, \phi) = c (\sin \vartheta)^\ell e^{im\phi}$

Normierung: $1 \stackrel{!}{=} \int |Y_\ell^m(\vartheta, \phi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi$ legt c fest.

$$\left(c = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \right)$$

Die Y_ℓ^m erhält man durch Leiterm. $l=1$ ist Hausaufgabe.

$$\left(Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \right)$$

↑
zugeordnete Legendre-Polynome

7.4 Kopplung von Drehimpulsen

Erinnerung:

Der Gesamtdrehimpuls von n Teilchen ist einfach die Summe der einzelnen Drehimpulse.

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^{\tilde{m}} \vec{L}^{(i)} \quad (\text{klassisch})$$

Auch quantenmechanische Drehimpulse können addiert werden. Z.B. die Bahndrehimpulse mehrerer Teilchen, aber auch Bahndrehimpuls und Spin eines Teilchens. Die Theorie ist nicht ganz einfach - wir skizzieren sie hier grob.

7.4.1 Mehrteilchensysteme

Betrachte zwei (unterscheidbare) Systeme mit H. R.

$$\mathcal{H}_1 \quad \text{mit OMB} \quad \{ |e_i\rangle \}_{i=1}^{d_1}$$

$$\mathcal{H}_2 \quad \text{mit OMB} \quad \{ |f_j\rangle \}_{j=1}^{d_2}$$

Bsp: • $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $\{ |\vec{x}^{(1)}\rangle \}_{\vec{x}^{(1)} \in \mathbb{R}^3}$
 $\mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $\{ |\vec{x}^{(2)}\rangle \}_{\vec{x}^{(2)} \in \mathbb{R}^3}$

• $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{(l=k_i)}$ Drehimpuls $-\frac{1}{2}$ mit Basen $\{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \}$
 $|\ell=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}\rangle, |\ell=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}\rangle$

• $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3)$ mit Basis $\{ |\vec{x}\rangle \}_{\vec{x} \in \mathbb{R}^3}$
 $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{(l=k_2)} \cong \mathbb{C}^2$ mit Basis $\{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \}$

Intuitiv: Zustand des Gesamtsystems liegt sicher dann fest, wenn erstes System in $|e_i\rangle$, zweites in $|f_j\rangle$ präpariert wurde.

↪ Def.: Gesamt-H.R. \mathcal{H}_{12} als H.R. mit ONB

$$|e_i f_j\rangle = |e_i\rangle |f_j\rangle = |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle = |i j\rangle \quad \begin{array}{l} i=1 \dots d_1 \\ j=1 \dots d_2 \end{array}$$

Allgemein: Sei $|\alpha\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle \in \mathcal{H}_1$

$$|\beta\rangle = \sum_j \beta_j |f_j\rangle \in \mathcal{H}_2$$

↪ Assoziiert damit dem Produktzustand oder Tensorprod. von Zuständen

$$|\alpha\rangle |\beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle := \sum_{i,j} \alpha_i \beta_j |e_i f_j\rangle \in \mathcal{H}_{12}$$

Sprechweise: $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist Tensorprodukt-Raum.

Bsp.: $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{(l=1/2)}$ Spin- $1/2$.

↪ \mathcal{H}_{12} hat Basis $\{ |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \}$

• $\mathcal{H}_i = L^2(\mathbb{R}^3) \rightsquigarrow \mathcal{H}_{12}$ hat Basis $\{ |\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}\rangle \}_{\vec{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^3}$

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \mathcal{H}_{12} &= L^2(\mathbb{R}^3 \oplus \mathbb{R}^3) \\ &= L^2(\mathbb{R}^6). \end{aligned}$$

• $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3) = \langle \{ |\vec{x}\rangle \}_{\vec{x} \in \mathbb{R}^3} \rangle$
 $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2 = \langle \{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \} \rangle$ } $\Rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \langle \{ |\vec{x}, s\rangle \}_{\substack{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \\ s \in \{\uparrow, \downarrow\}}} \rangle$

$$\mathcal{X}_2 = \mathbb{C}^2 = \langle \begin{pmatrix} 1 \\ \uparrow \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ \downarrow \end{pmatrix} \rangle$$

$$\int \Rightarrow \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2 = \langle \{ |\vec{x}\rangle, s \rangle \}_{\substack{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \\ s \in \{\uparrow, \downarrow\}}} \rangle$$

$$\begin{aligned} |0\rangle &\neq 0 \\ -|\frac{1}{2}\rangle &\neq |\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$


$$\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2 \ni |\psi\rangle = \sum_{\substack{s \in \{\uparrow, \downarrow\} \\ \vec{x} \in \mathbb{R}^3}} \psi(\vec{x}, s) |\vec{x}, s\rangle$$

$$\psi(\vec{x}, s) \Leftrightarrow \begin{cases} \psi_{\uparrow}(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, \uparrow) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, \downarrow) \end{cases} \cong L^2(\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^2)$$

Anmerkung: Nicht alle Vektoren in $\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2$ sind Produktvektoren:

$$\begin{aligned} \text{Bsp: } |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \\ &+ |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \end{aligned} \in \mathcal{X}_{(l=\frac{1}{2})} \otimes \mathcal{X}_{(l=\frac{1}{2})}$$

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \delta(\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}) \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$$

Solche Vektoren heißen verschränkt. \leadsto Später.

7.4.2 Lokale Operatoren

$$\text{Zu vor: } \mathcal{X}_1 = \left\{ \sum_i \alpha_i |e_i\rangle \right\}, \quad \mathcal{X}_2 = \left\{ \sum_j \beta_j |f_j\rangle \right\}$$

$$\leadsto \mathcal{X}_{12} = \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2 = \left\{ \sum_{ij} \alpha_{ij} |e_i f_j\rangle \right\}.$$

Betrachte nun Operator $A = \sum_{nk} A_{nk} |e_n\rangle\langle e_k|$ auf \mathcal{X}_1 .

Man kann A auf \mathcal{X}_{12} wirken lassen:

$$A^{(1)} (|e_i\rangle |f_j\rangle) := (A |e_i\rangle) |f_j\rangle = \sum_k A_{ki} |e_k\rangle |f_j\rangle.$$

Ebenso für B auf \mathcal{X}_2 .

Wichtig

Operatoren auf unterschiedlichen Teilsystemen kommutieren:

$$A^{(1)} (B^{(2)} |e_i\rangle |f_j\rangle) = A^{(1)} (|e_i\rangle (B |f_j\rangle)) = (A |e_i\rangle) (B |f_j\rangle)$$

$$= B^{(2)} (A^{(1)} |e_i\rangle |f_j\rangle)$$

$$\Rightarrow [A^{(1)}, B^{(2)}] = 0.$$

7.4.3 Gesamtdrehimpuls

$$\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{(l_i)} \quad \text{H. R. für Drehimpuls q.z. } l_i$$

$$\text{Also: } \mathcal{H}_{(l_i)} = \left\{ \sum_{m=-l}^l \pm_l |l, m\rangle \right\}$$

Bsp.: • $l_i = \frac{1}{2} \rightarrow \text{H.A.}$

• $l_1 = 1, l_2 = \frac{1}{2} \rightarrow e^- \text{ in } p\text{-Schale, mit Spin}$

Gesamt-H.R. $\mathcal{H}_{l_2} = \mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)}$ hat ONB $\left\{ \underbrace{|l_1, m_1, l_2, m_2\rangle}_{|m_1, m_2\rangle} \right\}_{m_i = -l_i}^{l_i}$

Lokale Drehimpulsoperatoren: $\vec{L}^{(i)} = (L_x^{(i)}, L_y^{(i)}, L_z^{(i)})$

Also, z.B.: $L_z^{(i)} |m_1, m_2\rangle = \hbar m_i |m_1, m_2\rangle$

Def.: Gesamtdrehimpuls $\vec{L} := \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)}$, also: $L_x = L_x^{(1)} + L_x^{(2)}$.

Beh.: \vec{L} ist q.m. Drehimpuls

Bew. i

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [L_x^{(1)} + L_x^{(2)}, L_y^{(1)} + L_y^{(2)}] \\ &= [L_x^{(1)}, L_y^{(1)}] + [L_x^{(2)}, L_y^{(2)}] \\ &= i\hbar L_z^{(1)} + i\hbar L_z^{(2)} = i\hbar L_z \quad \checkmark \end{aligned}$$

→ Auf $\mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)}$ kann E.W.-Gl.

$$\begin{cases} L_z |KLM\rangle = \hbar M |KLM\rangle \\ \vec{L}^2 |KLM\rangle = \hbar^2 L(L+1) |KLM\rangle \end{cases}$$

lösem.

Fragestellung: ① Welche Q.Z. L treten bei dieser Kopplung von l_1 und l_2 auf?

② Berechne die Entwicklungskoeffizienten

$$|LM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | LM \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}} |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten

7.4.4 Clebsch-Gordan-Zerlegung

Ziel: Auf $\mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)}$ Löse E.W.-Gd.:

$$\left\{ \begin{array}{l} L_z |KLM\rangle = \hbar M |KLM\rangle \\ L^2 |KLM\rangle = \hbar^2 L(L+1) |KLM\rangle \end{array} \right.$$

Betrachte dazu:

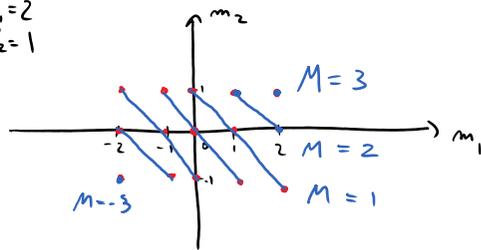
$$L_z = L_z^{(1)} + L_z^{(2)}$$

① Die Produkt-Basis $|m_1, m_2\rangle$ besteht bereits aus L_z -E.V.:

$$L_z |m_1, m_2\rangle = (L_z^{(1)} + L_z^{(2)}) |m_1, m_2\rangle = L_z^{(1)} |m_1, m_2\rangle + L_z^{(2)} |m_1, m_2\rangle = \hbar (m_1 + m_2) |m_1, m_2\rangle. \checkmark$$

Visualisiere L_z -Eigenwerte:

Bsp: $l_1=2$
 $l_2=1$



② \rightarrow Der höchste L_z -E.W. ist $M = l_1 + l_2$.

Er ist nicht entartet: $|l_1, l_2\rangle$ eindeutiger E.V.
 $\uparrow \quad \uparrow$
 $m_1 \quad m_2$

$\leadsto L = l_1 + l_2$ kommt ohne Entartung vor $\leadsto |L=l_1+l_2, M=l_1+l_2\rangle$

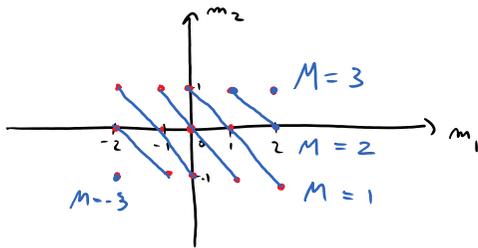
\leadsto Durch Absteigen entsteht Basis

$$= |l_1, l_2\rangle$$

$$\{ |L=l_1+l_2, M\rangle \}_{M=-l_1+l_2}^{l_1+l_2}$$

vom $\mathcal{H}_{(l_1+l_2)} \subset \mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)}$.

III



• Der L_z -E.R. zu $M=l_1+l_2-1$

ist 2-fach entartet:

$$|l_1, l_2-1\rangle$$

$$|l_1-1, l_2\rangle$$

• Im dem Raum lebt

$$|L=l_1+l_2, M=l_1+l_2-1\rangle$$

• Bis auf Phase eindeutig $|\pm\rangle$ mit

$$\textcircled{1} L_z |\pm\rangle = \hbar(l_1+l_2-1) |\pm\rangle$$

$$\textcircled{2} \langle \pm | L=l_1+l_2, M=l_1+l_2-1 \rangle = 0$$

$\leadsto L = l_1 + l_2 - 1$ kommt ohne Entartung vor:

Setze: $|L=l_1+l_2-1, M=l_1+l_2-1\rangle := |\pm\rangle$

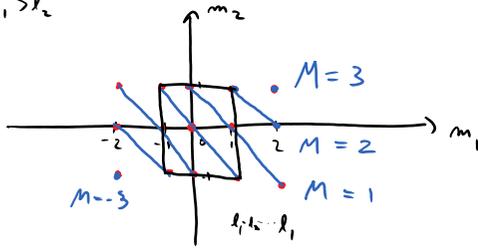
Erhalte durch Absteigen Basis vom $\mathcal{H}_{(l_1+l_2-1)} \subset \mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)}$.

• ... \leadsto setze fort \leadsto ...

┌ Findet C.-G.-Zerlegung ─┐

• ... \rightarrow setzen fort \rightarrow ...

$l_1 > l_2$



Finde C.-G.-Zerlegung

$$\mathcal{H}_{(l_1)} \otimes \mathcal{H}_{(l_2)} = \bigoplus_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \mathcal{H}_{(L)}$$

• $S_{\text{pin}-\frac{1}{2}} \otimes S_{\text{pin}-\frac{1}{2}} = S_{\text{pin}-1} \oplus S_{\text{pin}-0}$

⋮

8.1 Verschränkte Zustände

Bei der Betrachtung gekoppelter Drehimpulse, sind uns Zustände dieser Art untergekommen:

$$|\Psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{"Singulett"}$$

$$|\Psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|\Phi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)$$

$$|\Phi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$$

} "Triplet"

Beh.:

Dies Zst. sind verschränkt, also nicht von der Form $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$.

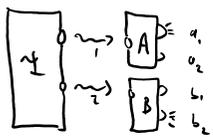
Dazu:

Betrachte Obs. $A = \sum_i a_i |e_i\rangle\langle e_i|$ auf \mathcal{X}_1 ,

$B = \sum_j b_j |f_j\rangle\langle f_j|$ auf \mathcal{X}_2 ,

Zst.vektor $|\Psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |e_i\rangle|f_j\rangle \in \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2$.

Misst man A am ersten, B am zweiten Teilchen, erhält man Ergebnis



(a_i, b_j) mit Wahrscheinlichkeit

$$\Pr[(a_i, b_j)] = |\langle \Psi | e_i f_j \rangle|^2 = |c_{ij}|^2.$$

Wenn $|\Psi\rangle = |\alpha\rangle|\beta\rangle$ mit $|\alpha\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle \in \mathcal{X}_1$

$$|\beta\rangle = \sum_j \beta_j |f_j\rangle \in \mathcal{X}_2$$

$$\Rightarrow \Pr[(a_i, b_j)] = |\langle a_i, b_j \rangle|^2 = |\alpha_i \beta_j|^2 = |\alpha_i|^2 |\beta_j|^2 = \Pr[a_i] \cdot \Pr[b_j].$$

Produktverteilung.

Also: Lokale Messungen an Produktvektoren führen zu Produktverteilungen.

⇒ So kann man Verschränkung nachweisen.

Bsp: $|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$

$$A = B = \sigma_z = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|.$$

$$\Rightarrow \Pr[\uparrow\uparrow] = |\langle\uparrow\uparrow|\Psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\Pr[\uparrow\downarrow] = |\langle\uparrow\downarrow|\Psi\rangle|^2 = 0$$

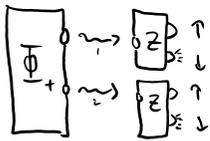
$$\Pr[\downarrow\uparrow] = \dots = 0$$

$$\Pr[\downarrow\downarrow] = \dots = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2} = \Pr[\uparrow\uparrow] \neq \Pr[\uparrow_{(1)}] \Pr[\uparrow_{(2)}] = \frac{1}{4}$$

⇒ Die Spinrichtungen sind korreliert.

8.2 Die Socken des Reinhard Bertlmann



Verschränkung führt also zu korrelierten Messausgängen. Sowohl in der Populär- wie auch, leider, gelegentlich in der Fachliteratur, wird so getan, als wäre das sehr überraschend.

"Sobald das erste Teilchen durch den ↓-Pfad gegangen ist, dann liegt instantan der Zustands des zweiten Teilchens fest! Auch wenn die Teilchen bei der Messung weit entfernt voneinander waren. Geisterhafte Fernwirkung! Quantenmagie!"

Oder so.

1. Das Argument ist quatsch. Korrelationen gibt es auch klassisch. Vergleiche: [Die Socken des Herrn Bertlmann](#).

In einer gerechten Welt hätten Blödmänner nie recht und schlechte Argumente würden immer zu einem falschen Ergebnis führen. Die Welt ist nicht gerecht:

2. Geisterhafte Fernwirkung und Quantenmagie beschreibt die Situation aber trotzdem sehr gut! Um einzusehen, dass Quantenkorrelationen tatsächlich merkwürdig sind, muss man aber etwas härter arbeiten.

8.3 Bell-Ungleichungen: Übersicht

Bis auf weiteres vergessen wir die Quantenmechanik! Die folgenden Argumente beziehen sich lediglich auf die Analyse experimenteller Daten und gelten unabhängig von einer spezifischen Theorie.

Ziel ist es, zu beweisen, dass in diesem Universum:

1. Physikalische Größen existieren nicht unabhängig von Beobachtungen.
2. Es gibt Zufallsprozesse, bei denen Wahrscheinlichkeiten nicht nur mangelndes Wissen über die Wirklichkeit beschreiben.
3. Informationen kann im Allgemeinen nicht kopiert werden.
4. Es gibt Paare physikalische Größen, die nicht gleichzeitig gemessen werden können.

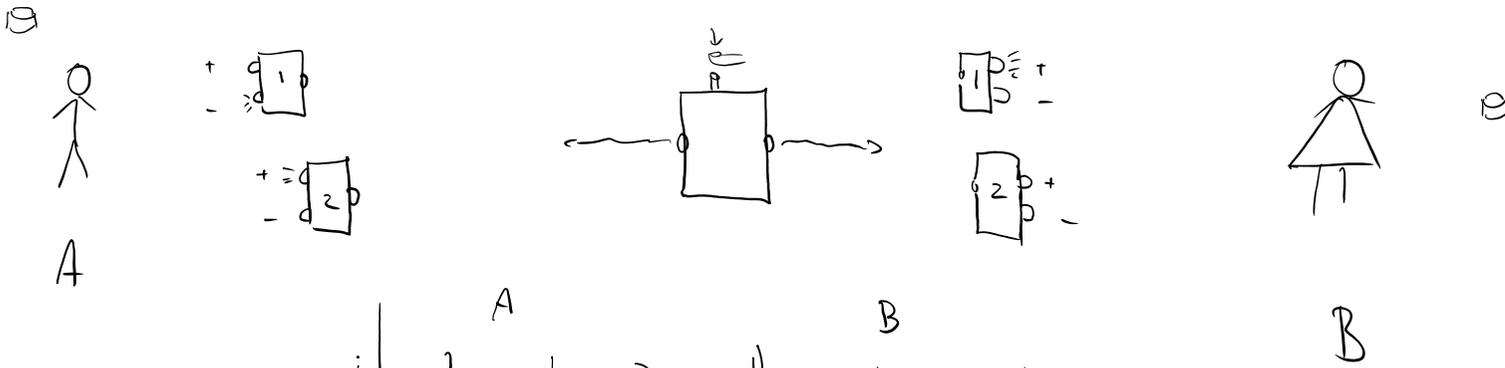
All dies sind empirische Tatsache, die jede Theorie erfüllen muss!

Das Ganze ist ziemlich einfach.

8.3.1 Epistemische Selbstverteidigung

Nur als Video verfügbar.

8.3.2 Das CHSH-Szenario



	A		B	
i	1	2	1	2
1	+			+
2		+	+	
3	-		+	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N				

8.3.3 Die CHSH-Ungleichung

Annahme: Die Größen existieren unabhängig von Alices und Bobs Wahl, welche gemessen werden.

Die Daten können also so beschrieben werden:

1. Es existiert irgendeine Zuweisung von Werten ± 1 zu jeder denkbaren Messung.
2. Durch Münzwurf entscheiden wir uns in jedem Durchgang, welchen der bereits existenten Werte wir beobachten.

i	A		B		C
	A_1	A_2	B_1	B_2	
1	+	-	+	+	2
2	-	+	+	+	...
3	-	-	+	+	...
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N					

Behauptung: Aus dieser Annahme folgen beobachtbare Konsequenzen, selbst wenn man keinerlei Annahmen darüber macht, welche Werte die nicht-beobachteten Größen annehmen.

Dazu:

$$C = A_1 B_1 + A_1 B_2 + A_2 B_1 - A_2 B_2$$

Beh.: $C \leq 2$.

Bew.: $C = A_1 (B_1 + B_2) + A_2 (B_1 - B_2) \leq 2$.

Dann auch $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C^{(i)} \leq 2$.

Aber: $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C^{(i)} = E[C]$

$$= E[A_1 B_1] + E[A_1 B_2] + E[A_2 B_1] - E[A_2 B_2]$$

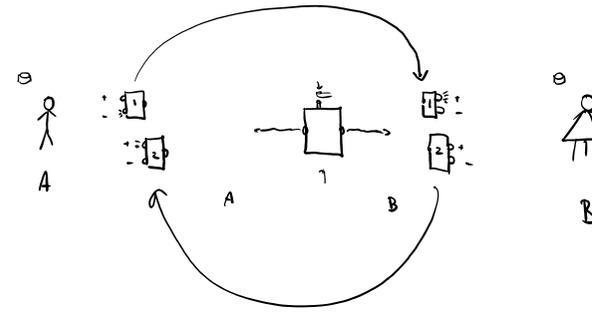
$$\leq 2$$

Misse: $E[A_1 B_1] + E[A_1 B_2] + E[A_2 B_1] - E[A_2 B_2] = 2,7 > 2.$ ✓

8.3.4 Schlupflöcher

Sie mögen die Schlussfolgerungen aus der letzten Lektion nicht?

In die Analyse sind einige implizite Annahmen eingefloßen, die man auch ablehnen kann. In der Literatur ist hier von *loopholes*, als Schlupflöchern, die Rede.

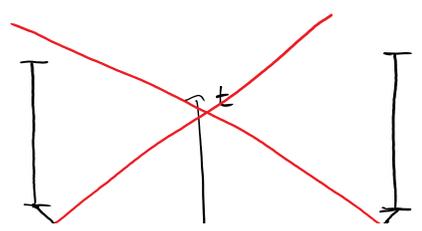


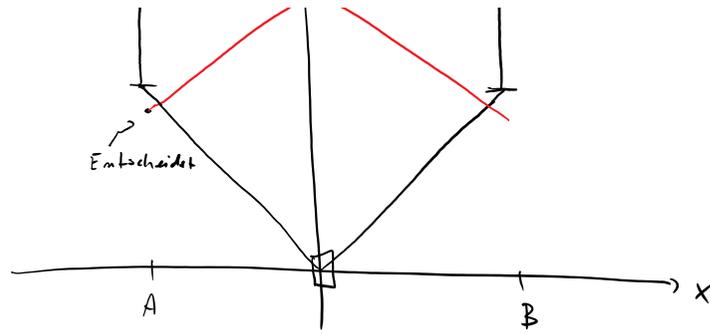
① Measurement loophole



② Free will loophole

③ Locality Loophole





8.4 Verletzungen von CHSH in der QM

Wir hatten betont, dass wir für die Analyse der Bellschen Ungleichungen (z.B. in CHSH-Form) die Gültigkeit der Quantenmechanik *nicht* voraussetzen müssen. Die Schlussfolgerungen gelten also für jede Theorie, die mit den empirischen Informationen, die wir über die Natur gesammelt haben, verträglich ist.

Trotzdem ist es relevant zu fragen, ob die QM Bellverletzungen vorhersagt. Sie tut das tatsächlich - eine leichte Rechnung dazu ist Teil des aktuellen Übungsblatts. Alle beobachteten Bellverletzungen sind mit den Vorhersagen der QM kompatibel.

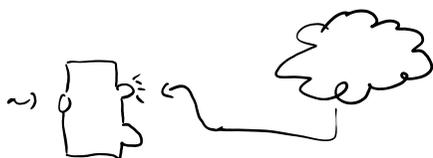
Rest: Übung.

8.5 Unmögliche Maschinen

Erinnern Sie sich an unseren Plan:

1. Physikalische Größen existieren nicht unabhängig von Beobachtungen. ✓
2. Es gibt Zufallsprozesse, bei denen Wahrscheinlichkeiten nicht nur mangelndes Wissen über die Wirklichkeit beschreiben. ✓
3. Informationen kann im Allgemeinen nicht kopiert werden ✓
4. Es gibt Paare physikalische Größen, die nicht gleichzeitig gemessen werden können. ✓

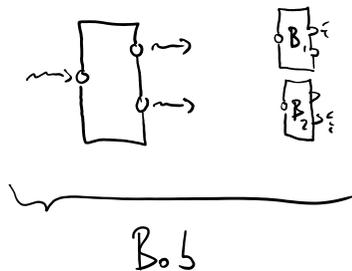
① Nehme an, es gäbe
 Prozess, den Messausgang
 vorhersagen könnte



→ ...

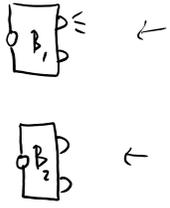
i	A		B	
	A_1	A_2	B_1	B_2
1	+	-	+	+
2	+	-	-	-
3	-	-	+	+
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N				

③

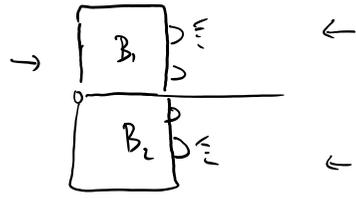


(4)

↔



|



9.1 Zentralpotentiale

Ziel: Löse stat. Schrödingergl. für Zentralpotential $V(\vec{r}) = V(r)$, $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$
 $r = \|\vec{r}\|$

Bsp.: • H-Atom: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$ (VL)

• Sphärisches Pendel: $V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$ (Übung)

Wir werden drei Lösungsansätze besprechen:

1. Analytisch: durch direktes Lösen der stationären Schrödingergleichung als partielle Differentialgleichung.
2. Algebraisch: Eine Quantenversion des Runge-Lenz-Vektors gibt zusätzlichen Erhaltungsgrößen. Deren Vertauschungsrelationen alleine geben Informationen über das Spektrum (vergl. Vorgehen beim Drehimpuls und harmonischen Oszillator).
3. Geometrisch: Die zusätzlichen EHGs entsprechen einer "versteckten" Symmetrie unter der Wirkung der vierdimensionalen Drehgruppen.

Keine der drei Vorgehensweisen ist leicht! Die erste ist in jedem Lehrbuch wiedergegeben. 2 und 3 sind etwas exotischer (auch wenn sie von Pauli und Fock bereits in den 20er und 30er Jahren des 20. Jahrhunderts beschrieben wurden). Wenn man 2 und 3 nicht im Detail versteht, ist das ein verkraftbarer Verlust...

Übersicht:

Zunächst gehen wir wie im klassischen Fall vor: Wir nutzen Drehimpulserhaltung, um das Lösung auf eine eindimensionales Potentialproblem für die Radialkoordinate unter einem effektiven Potential zurückzuführen (9.2.1 und 9.2.2).

Soweit so interpretierbar.

Die Lösung des eindimensionalen Problems erfordert keine tiefen Ideen, aber etwas Geduld und Konzentration. Wir werden wiederholt die Darstellung der Radialwellenfunktion verändern (von R zu u zu $y...$) um das Problem zu vereinfachen. Am Ende erreichen wir einen Potenzreihenansatz, der zu einer relativ leicht verdaulichen Rekursionsrelation der Entwicklungskoeffizienten der Potenzreihe führt. Zum Glück stellt sich heraus, dass die Potenzreihe notwendigerweise abbricht, also tatsächlich nur ein Polynom darstellt.

Also... Kaffee kochen, Augen reiben und durch!

9.2.1 Drehimpulserhaltung

Wie in der klassischen Mechanik, führt die Rotationsinvarianz des Potentials dazu, dass der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße ist, also mit dem Hamiltonoperator kommutiert. Hier schauen wir uns die Details an.

Erinnerung:
$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\tan \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{(\partial \phi)^2} \right)$$

Vergleich mit dem [Laplace-Operator in Kugelkoordinaten](#) gibt:

$$\begin{aligned} \frac{-\hat{p}^2}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} L^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \cdot \right) \\ &= \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} L^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{(dr)^2} (r \cdot) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow H = \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} L^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r \cdot) + V(r)$$

$\Rightarrow H, L^2, L_z$ kommutieren. Suche Lsg. der gem. EW.-Gld.:

$$\left\{ \begin{array}{l} \textcircled{1} \quad H \psi_{Elm} = E \psi_{Elm} \\ \textcircled{2} \quad L^2 \psi_{Elm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{Elm} \\ \textcircled{3} \quad L_z \psi_{Elm} = \hbar m \psi_{Elm} \end{array} \right.$$

Wir [wissen bereits](#), dass (2) und (3) implizieren, dass die Winkelabhängigkeit durch Kugelflächenfunktionen beschrieben wird:

$$\psi_{E, \ell, m}(r, \vartheta, \phi) = Y_{\ell}^m(\vartheta, \phi) \underbrace{R_{E, \ell}(r)}_{\text{zu bestimmender Radialteil}}$$

zu bestimmender Radialteil.

Für ① folgt damit:

$$H Y_{\ell}^m R_{E, \ell} = \left(\frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} L^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{(dr)^2} (r \cdot) + V(r) \right) Y_{\ell}^m R_{E, \ell}$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{(dr)^2} (r \cdot) + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} + V(r)}_{V_{\text{eff}}(r)} \right) Y_{\ell}^m R_{E, \ell}$$

$$\stackrel{!}{=} E Y_{\ell}^m R_{E, \ell}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{E, \ell}) + V_{\text{eff}}(r) R_{E, \ell} = E R_{E, \ell}}$$

Radialgleichung

Da die Radialgleichung nicht von m abhängt \Rightarrow Entartung von E, ℓ um $2\ell+1$.

9.2.2 Reduktion auf eindimensionales Potentialproblem

Ausgangspunkt:

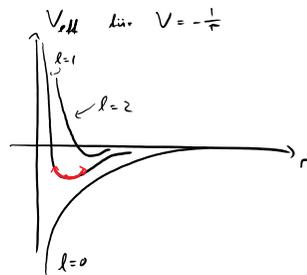
$$(*) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{(dr)^2} (r R_{E_l}(r)) + V_{eff}(r) R_{E_l}(r) = E R_{E_l}(r)$$

Def.: $u(r) = r R(r)$

\leadsto Ersetze $R(r) \leftrightarrow \frac{1}{r} u$ in (*) und multipliziere beide Seiten mit r :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 + V_{eff}(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Radialgleichung. Formel 1-D - Schrödingergl. (für $r \geq 0$) unter Potential + "Drehimpulsbarriere". [Analog zum klassischen Fall].



9.2.3 Einschränkung auf $1/r$ -Potential; Wechsel zu angepassten Einheiten

Ausgangspunkt:

$$(*) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 + V_{\text{eff}}(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Sei nun $V(r) = -k \frac{1}{r}$ und $E < 0$.

Wähle angepasste Einheiten:

$$a_0 := \frac{\hbar^2}{m k}$$

Bohr radius

$$s := r/a_0$$

$$E_I := \frac{m k^2}{2 \hbar^2}$$

Ionisierungsenergie

$$\lambda := \sqrt{-\frac{E}{E_I}}$$

\leadsto (*) wird zu:

$$\frac{-2 m a_0^2}{\hbar^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2 m r^2} - k \frac{1}{r} - E \right] u = 0$$

$$\Leftrightarrow \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} - \lambda^2 \right] u = 0$$

9.2.4 Abspaltung des asymptotischen Terms

Ausgangspunkt:

$$(*) \quad \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} + \lambda^2 \right] u = 0$$

Betrachte Limes $s \rightarrow \infty$:

$$\text{Dann: } (*) \rightarrow \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - \lambda^2 \right] u = 0 \Rightarrow u(s \rightarrow \infty) = A e^{\pm \lambda s}$$

wobei nur das neg. V2 beschränkte Lsg. liefert

$$\leadsto \text{Substituieren: } u(s) = e^{-\lambda s} y(s)$$

Nebenrechnung, um DGL für y aufzustellen:

$$\frac{d}{ds} u(s) = (-\lambda y + y') e^{-\lambda s}$$

$$\left(\frac{d}{ds} \right)^2 u(s) = (-\lambda y' + y'' + \lambda^2 y - \lambda y') e^{-\lambda s}$$

$$\leadsto (*): \quad \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} - \lambda^2 \right] u = 0$$

$$\Leftrightarrow \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - 2\lambda \frac{d}{ds} - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} \right] y = 0$$

9.2.5 Lösung durch Potenzreihenansatz

Ausgangspunkt:

$$(*) \left[\left(\frac{d}{ds} \right)^2 - 2\lambda \frac{d}{ds} - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} \right] y = 0$$

Potenzreihenansatz:

$$y(s) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q s^{q+s} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{ds} y(s) = \sum_q c_q (q+s) s^{q+s-1}$$

↑
kleinste auftretende Potenz $\leadsto c_0 \neq 0$.

$$\left(\frac{d}{ds} \right)^2 y(s) = \sum_q c_q (q+s)(q+s-1) s^{q+s-2}$$

Koeffizient von $(*)$ zu s^{q+s-2} :

$$c_q \left[(q+s)(q+s-1) - l(l+1) \right] + c_{q-1} \left[-2\lambda (q-1+s) + 2 \right] \stackrel{!}{=} 0$$

Für $q=0$:

$$c_0 \left[s(s-1) - l(l+1) \right] = 0 \quad (\Leftrightarrow) \quad \begin{aligned} s &= l+1 \\ s &= -l \end{aligned}$$

(singuläre Lsg. \leadsto unphysikalisch).

https://en.wikipedia.org/wiki/Brilliant_Light_Power

Mit $s=l+1$ ergibt sich Rekursionsgleichung:

$$(R) \quad c_q = c_{q-1} \frac{2(\lambda(q+l) - 1)}{(q+l+1)(q+l) - l(l+1)} = c_{q-1} \frac{2((q+l)\lambda - 1)}{q(q+2l+1)}$$

Beh.: $u(s \rightarrow \infty)$ ist endlich \Leftrightarrow Potenzreihe bricht ab.

Bew.: Für $q \rightarrow \infty$: $c_q \rightarrow c_{q-1} \frac{2\lambda}{q}$.

Vergl. mit Potenzreihe $\exp(2\lambda s) = \sum_{q=0}^{\infty} \underbrace{\frac{(2\lambda)^q}{q!}}_{=: d_q} s^q \rightsquigarrow \frac{d_{q-1}}{d_q} = \frac{2\lambda}{q}$.

Falls $c_q \neq 0$ für $q \rightarrow \infty$, wächst $y(s \rightarrow \infty)$ wie $e^{2\lambda s}$

$\Rightarrow u(s \rightarrow \infty) = e^{-\lambda s} y(s) \rightarrow \infty$.

□

\Rightarrow Potenzreihe für physik. Lsg. muss abbrechen.

\Rightarrow Für jedes $\lambda = \sqrt{\frac{E}{E_I}}$ dass Energie-E.W. entspricht, gibt es ein kleinstes $q_0 \in \mathbb{N}$ s.d. $c_{q_0} = 0$.

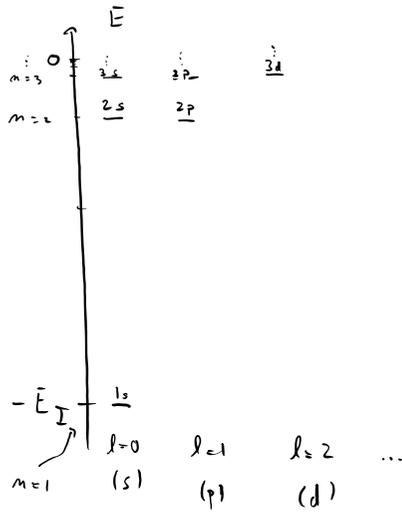
$$(R) \Rightarrow (q_0 + l)\lambda = 1 \quad \Leftrightarrow \quad E = -E_I \frac{1}{(q_0 + l)^2} \quad q_0 \in \mathbb{N}, l \in \mathbb{N}_0$$

$$= -E_I \frac{1}{m^2} \quad m = (q_0 + l), m \in \mathbb{N}, m > l.$$

\Rightarrow Energiequantisierung

9.5.6 Diskussion der Lösungen

Energie-Eigenwerte



Zuvor:

$$E_m = -E_I \frac{1}{m^2} \quad m = (q, l), \quad m \in \mathbb{N}, \quad m > l.$$

Jedes Paar m, l ist $(2l+1)$ -fach entartet

Insgesamt: Energieentartung ist $\frac{m(m-1)}{2}$

$$d(E_m) = \sum_{l=0}^{m-1} (2l+1) = m + 2 \sum_{l=1}^{m-1} l = m^2.$$

Entartungen sind häufig Zeichen einer Symmetrie. Wir hatten zuvor festgehalten, dass eine $(2l+1)$ -fache Entartung der Energie eine direkte Konsequenz der Rotationsinvarianz ist (und daher für alle Zentralpotentiale auftritt). Es ist nicht offensichtlich, ob man die hier gefundene, wesentlich größere, Entartung auch explizit aus einer Symmetrie herleiten kann.

Wir gehen dem als nächstes nach.

Eigenfkt.:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = Y_m^l(\vartheta, \varphi) e^{-\lambda r/a_0} \gamma_{nl}(r/a_0)$$

$$\underline{n=1, l=0, m=0}$$

$$\leadsto \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$\underline{n=2, l=0, m=0}$$

$$\leadsto \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} e^{-r/2a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)$$

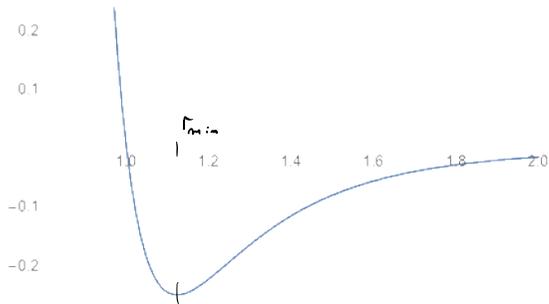
⋮

9.3 Algebraischer Ansatz

9.4 Geometrischer Ansatz

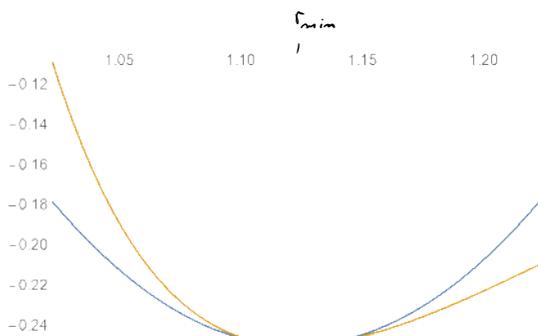
10.1 Störtheorie

Motivation: Betrachte Lennard-Jones-Potential:



Wechselwirkungspotential zwischen ungeladenen Atomen.

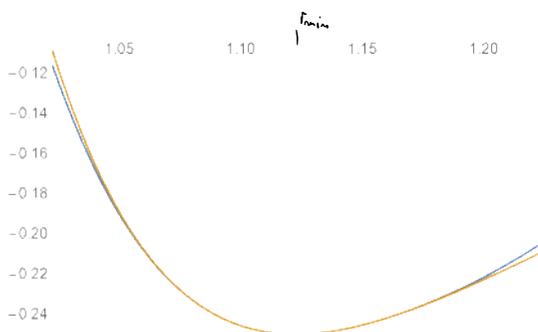
Wir erwarten, dass sie sich bevorzugt im Abstand r_{\min} voneinander aufhalten.



Schwingungen um Ruhelage können durch harmonisches Modell gemähert werden.

Im geeigneten Einheiten:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$



Näherung zu 3. Ordnung deutlich besser,

aber

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + c_2 X^2 + c_3 X^3$$

nicht analytisch lösbar.

... ..

→ Watt num?

10.2 Zerlegung des Hamiltonoperators

Ansatz

$$H = \underbrace{H_0}_{\text{"ungestört"}} + \lambda \underbrace{W}_{\text{Störterm}} = H(\lambda)$$

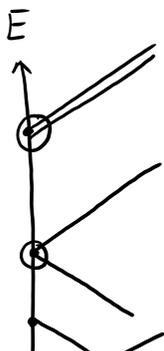
↑
Störparameter

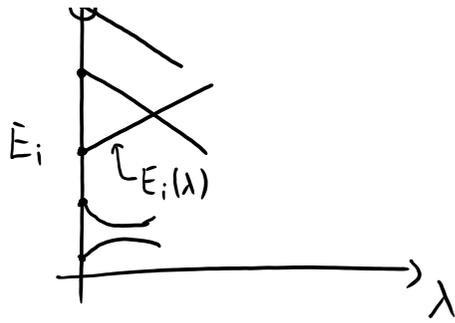
Annahme:

E.W. - Gleichung für H_0 kann explizit gelöst werden:

$$H_0 |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$$

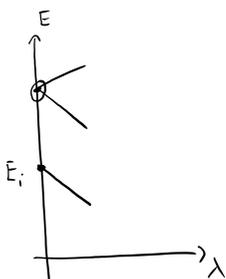
Ziel: beschreibe " $E_i(\lambda), |\psi_i(\lambda)\rangle$ " für "kleine" λ .





10.3 Potenzreihenansatz (Rayleigh-Schrödinger)

Sei zunächst E_i nicht entartet, $E_i(\lambda)$ für kleine λ also wohl-def.



→ Def.: $|\psi_i(\lambda)\rangle$ durch

$$\textcircled{1} \quad H(\lambda) |\psi_i(\lambda)\rangle = E_i(\lambda) |\psi_i(\lambda)\rangle \quad (\text{E.W.-Gl.})$$

$$\textcircled{2} \quad \langle \psi_i(\lambda) | \psi_i \rangle = 1 \quad (\text{"Normalisierung"})$$

$$\triangle \quad \langle \psi_i(\lambda) | \psi_i(\lambda) \rangle = \sum_j |\langle \psi_j | \psi_i(\lambda) \rangle|^2 = 1 + \underbrace{\sum_{j \neq i} |\langle \psi_j | \psi_i(\lambda) \rangle|^2}_{\geq 0}$$

Potenzreihenansatz:

$$E_i(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E_i^{(n)} \lambda^n$$

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_i^{(n)}\rangle \lambda^n \quad \text{"Vektorielle Potenzreihe"}$$

Grundlegende Rechnung: Setze Ansatz in E.W.-Gl. $\textcircled{1}$ ein:

$$(H_0 + \lambda W) \sum_m |\psi_i^{(m)}\rangle \lambda^m - \left(\sum_m E_i^{(m)} \lambda^m \right) \left(\sum_m |\psi_i^{(m)}\rangle \lambda^m \right) = 0 \quad (*)$$

Störtheorie $\hat{=}$ sortiere linke Seite nach Potenzen von λ .

10.4 Energiekorrektur zur ersten Ordnung

Ausgangspunkt:

$$(H_0 + \lambda W) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\psi_i^{(n)}\rangle - \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_i^{(n)} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\psi_i^{(n)}\rangle \right) = 0 \quad (*)$$

Terme $\sim \lambda^0$:

$$H_0 |\psi_i^{(0)}\rangle - E_i^{(0)} |\psi_i^{(0)}\rangle = 0$$

$$\leadsto \begin{cases} E_i^{(0)} = E_i \\ |\psi_i^{(0)}\rangle = |\psi_i\rangle \end{cases}$$

Terme $\sim \lambda^1$:

$$H_0 |\psi_i^{(1)}\rangle + W |\psi_i\rangle - E_i |\psi_i^{(1)}\rangle - E_i^{(1)} |\psi_i\rangle = 0$$

\Leftrightarrow

$$(H_0 - E_i) |\psi_i^{(1)}\rangle + (W - E_i^{(1)}) |\psi_i\rangle = 0 \quad (\Delta)$$

Um Formel für $E_i^{(1)}$ zu erhalten, multipliziere (Δ) mit $\langle \psi_i |$:

$$\underbrace{\langle \psi_i | (H_0 - E_i) | \psi_i^{(1)} \rangle}_{(E_i - E_i) \langle \psi_i | \psi_i^{(1)} \rangle} + \langle \psi_i | W | \psi_i \rangle - E_i^{(1)} \underbrace{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}_{=1} = 0$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{=0}$

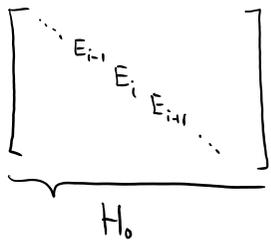
Also:

- $E_i^{(1)} = \langle \psi_i | W | \psi_i \rangle$

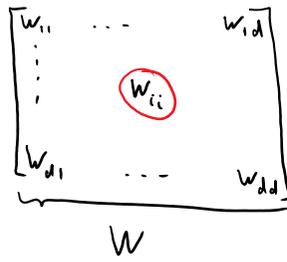
- $E_i(\lambda) = E_i + \lambda \langle \psi_i | W | \psi_i \rangle + O(\lambda^2)$

- Der lineare Term der Störreihe eines Energieniveaus ist durch das Matrixelement der Störung zwischen den Eigenvektoren gegeben.

- Matrix-Notation



+ λ



$$\leadsto E_i(\lambda) = E_i + w_{ii} \cdot \lambda + O(\lambda^2).$$

10.5 Beispiel: Anharmonischer Oszillator

(Einfachheit halber: $\hbar = \omega = m = 1$)

$$H = P^2 + X^2$$

$$W = X^4 = \frac{1}{4} (a + a^\dagger)^4$$

$$\leadsto E_0^{(4)} = \langle 0 | X^4 | 0 \rangle = \frac{1}{4} \langle 0 | (a + a^\dagger)^4 | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{4} \langle 0 | a (a a^\dagger + a^\dagger a) a^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 1} + \sqrt{1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1} \right) = \frac{3}{4}$$

$$\leadsto E_0(\lambda) = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \lambda$$

10.6 Eigenvektoren: Korrektur erster Ordnung

Ausgangspunkt:

$$H_0 - E_i |\psi_i^{(0)}\rangle + (W - E_i^{(1)}) |\psi_i\rangle = 0 \quad (\Delta)$$

Zuvor betrachtet: Projektion auf $\langle \psi_i |$

Da steckt noch was drin: projiziere auf $\langle \psi_j |$, $j \neq i$.

$$(E_j - E_i) \langle \psi_j | \psi_i^{(0)} \rangle + \langle \psi_j | W | \psi_i \rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle \psi_j | \psi_i^{(0)} \rangle = \frac{\langle \psi_j | W | \psi_i \rangle}{E_i - E_j} \quad (j \neq i)$$

Fehlt noch Info zu $\langle \psi_i | \psi_i^{(0)} \rangle$.

Normierung: $1 = \langle \psi_i | \psi_i(\lambda) \rangle = 1 + \langle \psi_i | \sum_{m=1}^{\infty} \lambda^m |\psi_i^{(m)}\rangle \Rightarrow \langle \psi_i | \psi_i^{(m)} \rangle = 0 \quad \forall m > 0.$

\Rightarrow Korrektur der E. V. 1. Ord:

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = |\psi_i\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{\langle \psi_j | W | \psi_i \rangle}{E_i - E_j} |\psi_j\rangle$$

"je näher E_j an E_i , desto größer der Beitrag von $|\psi_j\rangle$ zur Korrektur".

10.7 Energiekorrektur zweiter Ordnung

Ausgangspunkt:

$$\left(H_0 + \lambda W \right) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\psi_i^{(n)}\rangle - \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_i^{(n)} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\psi_i^{(n)}\rangle \right) = 0 \quad (*)$$

Terme $\sim \lambda^2$:

$$H_0 |\psi_i^{(2)}\rangle + W |\psi_i^{(1)}\rangle - E_i^{(2)} |\psi_i\rangle - E_i |\psi_i^{(2)}\rangle - E_i^{(1)} |\psi_i^{(1)}\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow (H_0 - E_i) |\psi_i^{(2)}\rangle + (W - E_i^{(1)}) |\psi_i^{(1)}\rangle - E_i^{(2)} |\psi_i\rangle = 0$$

Projiziere auf $\langle \psi_i |$:

$$\langle \psi_i | W | \psi_i^{(1)} \rangle - E_i^{(2)} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{E_i^{(2)}} = \langle \psi_i | W \sum_{j \neq i} \frac{\langle \psi_j | W | \psi_i \rangle}{E_i - E_j} |\psi_j\rangle = \boxed{\sum_{j \neq i} \frac{|\langle \psi_i | W | \psi_j \rangle|^2}{E_i - E_j}}$$

10.8 Beispiel: Linear gestörter harmonischer Oszillator

10.9 Störung eines entarteten Eigenwerts

10.10 Beispiel

Themen:

- Orga
- Fragen zum Einführungskapitel

Inverted Classroom zur Wahrscheinlichkeitstheorie, soweit wir kommen.

- Besprechen Sie die Begriffe von Maß, Dichte, und kumulative Wahrscheinlichkeit anhand der vier gegebenen Beispiele in 2.1. Wie heißt doch gleich die spezielle Funktion, durch die man die kumulative Verteilung einer eindimensionalen Normalverteilung beschreibt?
- Frage am Ende von 2.1: Wie unterscheiden sich Dichten von Wahrscheinlichkeiten?
- Bewerte Beispiele 1 - 5 durch den Blickwinkel der beiden Interpretationen in 2.2.
- 2.3: Was ist der Unterschied zwischen Erwartungswert und Mittelwert?

2. Online-Sitzung

6a Zu zeigen: $\alpha, \beta \in L^2(\mathbb{R}^m)$

$$\langle U_{\Phi} \alpha \mid U_{\Phi} \beta \rangle = \langle \alpha \mid \beta \rangle \quad \forall \alpha, \beta$$

||

$$\int_{\mathbb{R}^m} \underbrace{\alpha(\Phi^{-1}(\vec{x}))}_{\vec{y}} \beta(\Phi^{-1}(\vec{x})) d^m \vec{x}$$

||

$$\int \alpha(\vec{y}) \beta(\vec{y}) \underbrace{\left| \det \frac{\partial \Phi_i}{\partial y_j} \right|}_{=1} d\vec{y}$$

||

$$\langle \alpha \mid \beta \rangle.$$

6b

$$U = \sum_i |e_i\rangle \langle f_i| \quad \leftarrow$$

$$\begin{aligned}
 U^\dagger U &= \sum_{ij} |f_i\rangle \underbrace{\langle e_i | e_j \rangle}_{\delta_{ij}} \langle f_j| \\
 &= \sum_i |f_i\rangle \langle f_i| = \mathbb{1} \quad \checkmark
 \end{aligned}$$

$$U |f_i\rangle = |e_j\rangle$$

Umgekehrt, sei $U \in U(\mathcal{X})$.

Wähle $\sum |f_i\rangle_{f_i}$ beliebige ONB.

$$\left[\text{z.Z. : } U = \sum_i |e_i\rangle \underbrace{\langle f_i|}_{\text{geeignet.}} \right]$$

Def.: $|e_i\rangle = U |f_i\rangle$ $\in \mathcal{X}$

geraden Fkt.
Umj. Fkt.

→ Ausblick:

Kombiniere

Q.S.

↓ ONB

$$\mathcal{H}_I = \left\{ \sum_i \alpha_i |a_i\rangle \mid \alpha_i \in \mathbb{C} \right\}, \quad L^2(\mathbb{R})$$

$$\{ |\delta_x\rangle \}_x$$

$$\mathcal{H}_{II} = \left\{ \sum_j \beta_j |b_j\rangle \mid \beta_j \in \mathbb{C} \right\}$$

$$\{ |k\rangle \}_k$$

⇒ " $\mathcal{H}_{I \text{ und } II}$ " = $\mathcal{H}_I \otimes \mathcal{H}_{II}$

• H.R. mit Basis
 $\{ |a_i b_j\rangle \}_{i,j}$

• $\left(\sum_i \alpha_i |a_i\rangle \right) \left(\sum_j \beta_j |b_j\rangle \right)$

$= \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \underbrace{|a_i\rangle |b_j\rangle}_{|a_i b_j\rangle}$

• Ununterscheidbare Teilchen

$$\{ |a_i\rangle \} \quad | \quad \{ |a_j\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{I \text{ und } II} = \text{Sym} \left(\mathcal{H}_I \otimes \mathcal{H}_{II} \right) = \{ | \pm \rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |a_i a_j\rangle \}$$

↓
 $|a_i a_j\rangle$

$\pi | \pm \rangle = | \pm \rangle$ }

$\pi |a_i a_j\rangle = |a_j a_i\rangle$

$$\begin{aligned} & \Pi (|a_i a_j\rangle + |a_j a_i\rangle) \\ & = |a_j a_i\rangle + |a_i a_j\rangle \end{aligned}$$

• Kombination N v.v. Teilchen:

$$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle$$

$$|a_0 a_0 a_1\rangle$$

$$\rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |001\rangle + |010\rangle + |100\rangle \\ |000\rangle \\ |112\rangle + |231\rangle + |312\rangle + |213\rangle + \dots \end{array} \right.$$

$$a_i^\dagger : \underbrace{|\psi\rangle}_{N \text{ Teilchen}} \mapsto \text{Sym}(\underbrace{|\psi\rangle |b_i\rangle}_{(N+1) \text{ Teilchen}})$$

$$\text{Bsp.: } a_i^\dagger |000\rangle = \text{Sym}(|000\rangle |1\rangle)$$

$$= |1000\rangle + |0100\rangle + \dots + |0001\rangle$$

$$a_i := (a_i^\dagger)^\dagger$$

$$\leadsto [a_i, a_j^\dagger] = \dots = \mathbb{1} \delta_{ij}$$

google.com

- ① Aut.
- ② Key exchange ← Diffie-Hellman
- ③ Verschlüsselte Kommunikation.

