Mathematische Grundlagen (zwecks Formulierung allg. Postulate):

Dirac-Notation:

- statt ψ schreibe $\boxed{|\psi\rangle \quad („\text{ket } \psi“)}$
  " φ " $|\varphi\rangle$
  " $\alpha\psi + \beta\varphi$ " $\alpha|\psi\rangle + \beta|\varphi\rangle$ etc.

- der duale Vektor (auch: hermitesch adjungierte Vektor) $\boxed{\langle\psi| \quad („\text{bra } \psi“)}$ ist definiert durch seine Wirkung auf bel. $|\varphi\rangle$:

$$\boxed{\langle \psi | \varphi \rangle \equiv \langle \psi, \varphi \rangle}$$

„bra" „ket" ≡ „bracket"

d.h. $\langle\psi|$ ist die lin. Abb: $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$

$$|\varphi\rangle \longmapsto \langle\psi|\varphi\rangle := \langle\psi,\varphi\rangle$$

Beispiel:

- Projektion auf φ: $P_\varphi : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$
  $(\|\varphi\| = 1)$ $\quad \psi \mapsto P_\varphi\psi := \langle\varphi,\psi\rangle\varphi$

  in Dirac-Notation: $\boxed{P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|}$ $\quad (\langle\varphi|\varphi\rangle = 1)$

$\to$ Anwendung auf $|\psi\rangle$:

$$P_\varphi|\psi\rangle = |\varphi\rangle\underbrace{\langle\varphi|\psi\rangle}_{\in\mathbb{C}} = \langle\varphi|\psi\rangle|\varphi\rangle \left(\equiv \langle\varphi,\psi\rangle\varphi\right)$$

Operatoren in der Quantenmechanik

Def.: <u>Operator</u> A $\equiv$ <u>lineare Abb.</u> $A: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle = \ldots$$

Abbildungs-vorschrift

d.h. $A(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = A|\psi\rangle + A|\varphi\rangle$

$A(\lambda|\psi\rangle) = \lambda(A|\psi\rangle) \equiv \lambda A|\psi\rangle$

- <u>Operatoraddition</u>

$A + B$ erklärt durch $(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$

- <u>Operatorskalarmultiplikation</u>

λA erklärt durch $(\lambda A)|\psi\rangle = \lambda(A|\psi\rangle)$

- <u>Operatormultiplikation</u> ($\equiv$ Verkettung)

AB erklärt durch $(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$

(d.h. $AB \equiv A \circ B$)

Vorsicht: i. A. $AB \neq BA$

- <u>Operatorpotenz</u>

$$A^n = \underbrace{AA\cdots A}_{n \text{ mal}} \qquad (n \in \mathbb{N})$$

Def: $A^0 = \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \equiv id_{\mathcal{H}} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi\rangle$$

Beispiele (in Dirac-Notation)

1) Projektion auf $|\varphi\rangle$: $\qquad P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ ✓

2) $\mathcal{H}$ zweidimensional, $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ ONB

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right)$$

a) $\qquad A := |\psi_2\rangle\langle\psi_1| - |\psi_1\rangle\langle\psi_2|$

$$\rightarrow \quad A|\psi_1\rangle = \left(|\psi_2\rangle\langle\psi_1| - |\psi_1\rangle\langle\psi_2|\right)|\psi_1\rangle$$

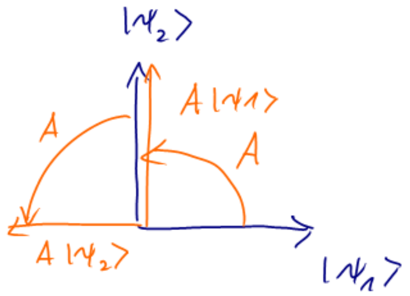
$$= |\psi_2\rangle\underbrace{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}_{=1} - |\psi_1\rangle\underbrace{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}_{=0}$$

$$= |\psi_2\rangle$$

analog: $\quad A|\psi_2\rangle = -|\psi_1\rangle$

$$A|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_2\rangle - |\psi_1\rangle\right)$$

d.h. $\qquad A \approx$ Drehung um $\pi/2$



b) $\qquad B := |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$

$$\rightarrow \quad B|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle, \qquad B|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle,$$

d.h. $\quad B$ ist die Identität auf $\mathcal{H}$: $\quad B = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$

3) „Zerlegung der Eins":

$|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ beliebige ONB von $\mathcal{H}$

$$\rightarrow \quad \boxed{\sum_{\ell=1}^{n} |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell| \overset{!}{=} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}}$$

⌈ denn $\left(\sum_{\ell=1}^{n} |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|\right)|\varphi_i\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} |\varphi_\ell\rangle\underbrace{\langle\varphi_\ell|\varphi_i\rangle}_{\delta_{\ell i}} = |\varphi_i\rangle$ ⌋

4) $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ ONB

$\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$

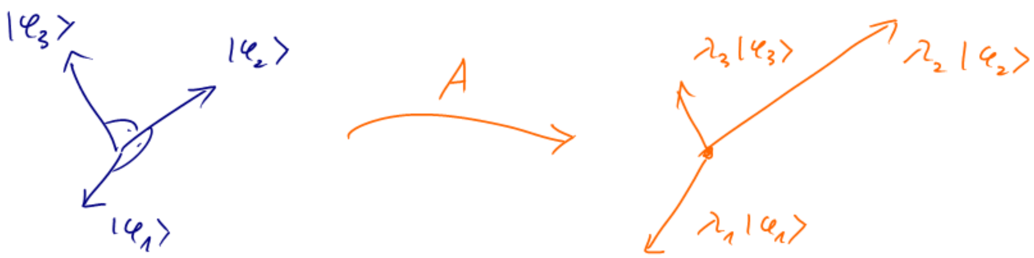
$$A := \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_\ell |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|$$

$$\rightarrow \quad A|\varphi_i\rangle = \left(\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_\ell |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|\right)|\varphi_i\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_\ell |\varphi_\ell\rangle\overbrace{\langle\varphi_\ell|\varphi_i\rangle}^{\delta_{\ell i}}$$

d.h. $\boxed{A|\varphi_i\rangle = \lambda_i |\varphi_i\rangle}$

Wirkung von A auf Basisvektor $|\varphi_i\rangle$ ≡ Skalarmultiplikation mit λ_i

d.h. λ_i ist Eigenwert mit Eigenvektor $|\varphi_i\rangle$ des Operators A



Def: $\lambda \in \mathbb{C}$ ist Eigenwert mit Eigenvektor (-zustand) $|\varphi\rangle$ des Operators A

$$:\Longleftrightarrow \qquad A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$

Eigenwertgleichung

besonders wichtig für QM sind Operatoren, deren Eigenvektoren eine ONB bilden ("Eigenbasis") und deren Eigenwerte reell sind:

Def: A hermitescher Operator

$:\Longleftrightarrow$ es gibt $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ und ONB $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ derart, dass

$$A = \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_\ell |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|$$

Spektraldarstellung von A

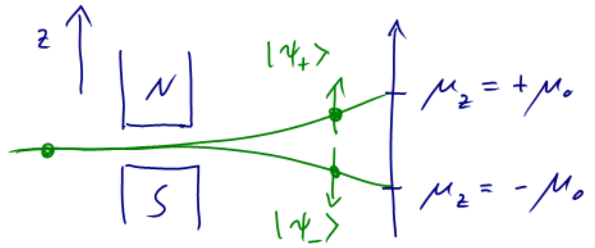
⌈ eine äquivalente Charakterisierung hermitescher Operatoren lautet:

$$A \text{ hermitesch} \Longleftrightarrow A \text{ selbstadjungiert: } A = A^+$$ ⌋

⌈ hermitesche Adjunktion: $A \mapsto A^+$: siehe unten ⌋

Physikalische Größen und hermitesche Operatoren

am Beispiel eines Stern-Gerlach-Magneten in $\hat{z}$-Ausrichtung:



$\hat{=}$ Messgerät für μ_z

$$\mu_z = \boxed{+\mu_0} \longleftrightarrow \text{Zustand } \boxed{|\psi_+\rangle}$$
$$\mu_z = \boxed{-\mu_0} \longleftrightarrow \text{" " } \boxed{|\psi_-\rangle} \qquad (1)$$

Messwerte, reell — Zustände, orthonormal

→ hermitescher Operator (2)

$$\hat{\mu}_z := +\mu_0 \underbrace{|\psi_+\rangle\langle\psi_+|}_{= P_{\psi_+}} - \mu_0 \underbrace{|\psi_-\rangle\langle\psi_-|}_{= P_{\psi_-}} = \mu_0 P_{\psi_+} - \mu_0 P_{\psi_-}$$

zur Unterscheidung von herm. Op. und physik. Größe

beachte: Falls Atom im Zustand $|\psi\rangle$, dann $\mu_z = +\mu_0$

mit Wkt.

$$\boxed{w_+} = |\langle\psi_+|\psi\rangle|^2 = \langle\psi_+|\psi\rangle^* \langle\psi_+|\psi\rangle$$
$$= \langle\psi \underbrace{|\psi_+\rangle\langle\psi_+|}_{P_{\psi_+}} \psi\rangle = \boxed{\langle\psi| P_{\psi_+} |\psi\rangle}$$

analog: $\mu_z = -\mu_0$ mit Wkt $\boxed{p_- = \langle\psi | P_{\psi_-} | \psi\rangle}$

$\rightsquigarrow$ μ_z - Messung an Atomen im Zustand $|\psi\rangle$ ergibt Messergebnisse mit Erwartungswert

$$\langle \mu_z \rangle_{|\psi\rangle} \equiv (+\mu_0)\, p_+ + (-\mu_0)\, p_-$$

$$= \mu_0 \langle\psi | P_{\psi_+} | \psi\rangle - \mu_0 \langle\psi | P_{\psi_-} | \psi\rangle$$

$$= \langle\psi | \underbrace{\mu_0 P_{\psi_+} - \mu_0 P_{\psi_-}}_{\stackrel{!}{=}\, \hat{\mu}_z} | \psi\rangle$$

d.h. $$\boxed{\langle \mu_z \rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi | \hat{\mu}_z | \psi\rangle} \qquad (3)$$

(Messung der) physikalische(n) Größe μ_z und hermiteschen Operator $\hat{\mu}_z$ stehen also gemäß (1), (2), (3) in direkter Beziehung zueinander!

Verallgemeinerung führt auf

Postulate der Quantenmechanik

(P1) Zustandsraum $\equiv$ komplexer Vektorraum mit hermiteschem Skalarprodukt $\langle \ldots, \ldots \rangle$ ("Hilbertraum $\mathcal{H}$")

Zustand $\hat{=}$ normierter Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

(P2) Messung und Zustandspräparation

physikalische Größe A $\hat{=}$ hermiteschem Operator

mit $A = \sum_{\ell=1}^{n} a_\ell \, |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_\ell|$ mit

möglichen Messwerten $\hat{=}$ Eigenwerten $a_1, \dots, a_n$

und Eigenzuständen $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$.

- Messung von A an System im Zustand $|\psi\rangle$ ergibt mit Wahrscheinlichkeit

$$\boxed{p_i = |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2}$$

den Messwert a_i (Bornsche Regel).

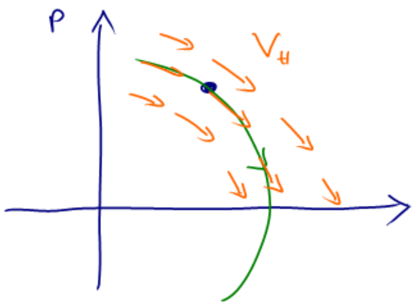
→ Erwartungswert der Größe A bei Messung im Zustand $|\psi\rangle$:

$$\boxed{\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|A|\psi\rangle}$$

Für jede Größe A gibt es ein ideales Messgerät derart, dass nach Messung von a_i System im Zustand $|\varphi_i\rangle$.

(P3) Dynamik : Wie entwickelt sich ein q.-m. Zustand in der Zeit : $|\psi(t)\rangle = ?$

Erinnerung : klassische Mechanik in Hamiltonscher Formulierung:

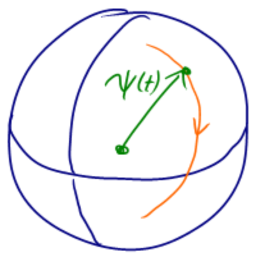


Zustand $x = (q, p)$ genügt Dynamik

$$\boxed{\dot{x}(t) = V_H(x(t))}$$

mit $V_H = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial q}\right)$

hier:



"Bahn" $\psi(t) \subset \{ |\psi\rangle \mid \|\psi\| = 1 \} \subset \mathcal{H}$

(für alle Zeiten ist $\|\psi(t)\| = 1$)

$\dot\psi(t) = f(\psi(t))$: $f(\psi) = ?$

QM postuliert: f ist lineare Abbildung, d.h.

$$\boxed{\dot\psi(t) \overset{!}{=} F\,\psi(t)}$$

mit Operator F derart, dass für alle Zeiten $\|\psi(t)\| = 1$.

Welche Anforderung stellt Normierung an F?

Dazu etwas mehr Mathematik:

Def: Hermitesche Adjunktion

der zu A hermitesch adjungierte Operator A^+ ist gegeben durch

$$(*) \qquad \boxed{\langle \psi, A\varphi\rangle \overset{!}{=} \langle A^+\psi, \varphi\rangle} \qquad \text{für alle } \psi, \varphi \in \mathcal{H}$$

Bemerkung: wegen $\langle A^+\psi, \varphi\rangle = \langle \varphi, A^+\psi\rangle^*$ ist $(*)$ äquivalent zu

$$\langle \psi, A\varphi\rangle \overset{!}{=} \langle \varphi, A^+\psi\rangle^*$$

in Dirac-Notation:

$$\boxed{\langle \psi | A | \varphi\rangle \overset{!}{=} \langle \varphi | A^+ | \psi\rangle^*} \qquad (*')$$

Beispiele und Rechenregeln

- $$\left(| x_1 \rangle\langle x_2 | \right)^+ = | x_2 \rangle\langle x_1 |$$

Γ denn $\langle \psi | x_1 \rangle\langle x_2 | \varphi \rangle = \langle x_1 | \psi \rangle^* \langle \varphi | x_2 \rangle^*$

$$= \left(\langle \varphi | x_2 \rangle\langle x_1 | \psi \rangle \right)^*$$

$$\underset{(*')}{\equiv} \langle \varphi | \left(| x_1 \rangle\langle x_2 | \right)^+ \psi \rangle^*$$

$$\rightarrow \left(| x_1 \rangle\langle x_2 | \right)^* = | x_2 \rangle\langle x_1 | \quad \lrcorner$$

- $$(A + B)^+ = A^+ + B^+$$
- $$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$$
- $$(AB)^+ = B^+ A^+$$
- $$(A^n)^+ = (A^+)^n$$
- $$(A^+)^+ = A$$

Def: A selbstadjungiert $:\Longleftrightarrow$ $A^+ = A$

Satz: A selbstadjungiert $\overset{!}{\Longleftrightarrow}$ A hermitesch

Γ „$\Leftarrow$" folgt sofort mit $A = \sum_\ell \lambda_\ell | \varphi_\ell \rangle\langle \varphi_\ell |$; $\lambda_\ell \in \mathbb{R}$

„$\Rightarrow$" vgl. Lineare Algebra: Diagonalisierbarkeit selbstadjungierter Abbildungen / Matrizen $\lrcorner$

zurück zu $\dot\psi(t) = F\psi(t)$, Normerhaltung $\|\psi(t)\|^2 = 1$

$$\rightarrow \quad 0 = \frac{d}{dt} \langle \psi(t), \psi(t) \rangle = \langle \underset{F\psi}{\underset{\parallel}{\dot\psi}}, \psi \rangle + \langle \psi, \underset{F\psi}{\underset{\parallel}{\dot\psi}} \rangle =$$

d.h. $\quad 0 = \underbrace{\langle F\psi, \psi\rangle}_{\langle \psi, F^+\psi\rangle} + \langle \psi, F\psi\rangle = \langle \psi, (F^+ + F)\psi\rangle$

gilt offenbar für alle $\psi \in \mathcal{H}$; dann aber auch für alle $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ $\quad \boxed{\langle \psi, (F^+ + F)\varphi\rangle = 0}$; $(*)$

[denn mit $\chi = \psi + \varphi$ und $G = F^+ + F$ ist

$$0 = \langle \chi, G\chi\rangle = \underbrace{\langle \psi, G\psi\rangle}_{0} + \underbrace{\langle \varphi, G\varphi\rangle}_{0} + \langle \psi, G\varphi\rangle + \underbrace{\langle \varphi, G\psi\rangle}_{\langle \psi, G^+\varphi\rangle^*}$$

wegen $G = G^+$ also $\mathrm{Re}\langle \psi, G\varphi\rangle = 0$; mit $\chi = \psi + i\varphi$ erhalten wir analog $\mathrm{Im}\langle \psi, G\varphi\rangle = 0$]

$(*)$ impliziert offenbar $F^+ + F = 0$; d.h. $\boxed{F = -F^+}$; (1)

Zweckmäßigerweise setzen wir $F := -iH$, womit (1) äquivalent zu

$$H = H^+ \; ; \quad \text{d.h. } H \text{ hermitesch}$$

und damit einer physikalischen Größe entsprechend!

(welcher? $\to$ später)

wir halten fest:

(P3) $\quad \boxed{\frac{d}{dt}\psi(t) = -iH\psi(t)}$ mit hermiteschen Op. H.