gestern:

2. Postulat (Messpostulat)

- Observable $\hat{=}$ $\hat{A} = \sum_i a_i \, |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (= \hat{A}^{+})$

Messwerte   Eigenzustände

- Messwert a_i mit Wkt. $p_i = |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2$

$\rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

- Darstellung von Vektoren, Operatoren bzgl.

ONB $|\varphi_1\rangle, \ldots, |\varphi_n\rangle$

$\rightarrow$ $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$

- $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i \, |\varphi_i\rangle \;\hat{=}\; \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \underline{\psi}$

- $\langle\psi| = \sum_i \alpha_i^* \langle\varphi_i| \;\hat{=}\; (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \ldots, \alpha_n^*) = \underline{\psi}^{+}$

- $A = \sum_{ij} a_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \hat{=} \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \underline{\underline{A}}$

$\rightsquigarrow$ - $\langle \chi | \psi \rangle = \underline{\chi}^+ \underline{\psi} = (\beta_1^*, \dots, \beta_n^*) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \dots$

- $A|\psi\rangle = \underline{\underline{A}}\, \underline{\psi} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \dots$

- $\langle \chi | A | \psi \rangle = \underline{\chi}^+ \underline{\underline{A}}\, \underline{\psi} = (\beta_1^*, \dots, \beta_n^*) \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \dots$

- Adjunktion: $A \longrightarrow A^+$

def. durch

$$\boxed{\langle \chi, A\psi \rangle \overset{!}{=} \langle A^+\chi, \psi \rangle}$$

$\rightsquigarrow$ - $\langle A\chi, \psi \rangle = \langle \chi, A^+\psi \rangle$

- $(A+B)^+ = A^+ + B^+$

- $(cA)^+ = c^* A^+$

- $(AB)^+ = B^+ A^+$

- $(A^+)^+ = A$

- $\left(|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2| \right)^+ = |\varphi_2\rangle\langle\varphi_1|$

- $\left(\underline{\underline{A}} \right)^+ = \left(\underline{\underline{A}}^T \right)^*$

- A <u>hermitesch</u> $\Longleftrightarrow$ $A = A^+$

$$\Longleftrightarrow \quad A = \sum_i \underset{\substack{\uparrow \\ \text{reell}}}{a_i} \; \underset{\substack{\uparrow \\ \text{ONB}}}{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}$$

(Spektraldarstellung)

<u>Dynamik</u>

zeitliche Entwicklung:

?

$t = 0$

$$\psi(0) \xrightarrow{\quad t \quad} \psi(t) = ??$$

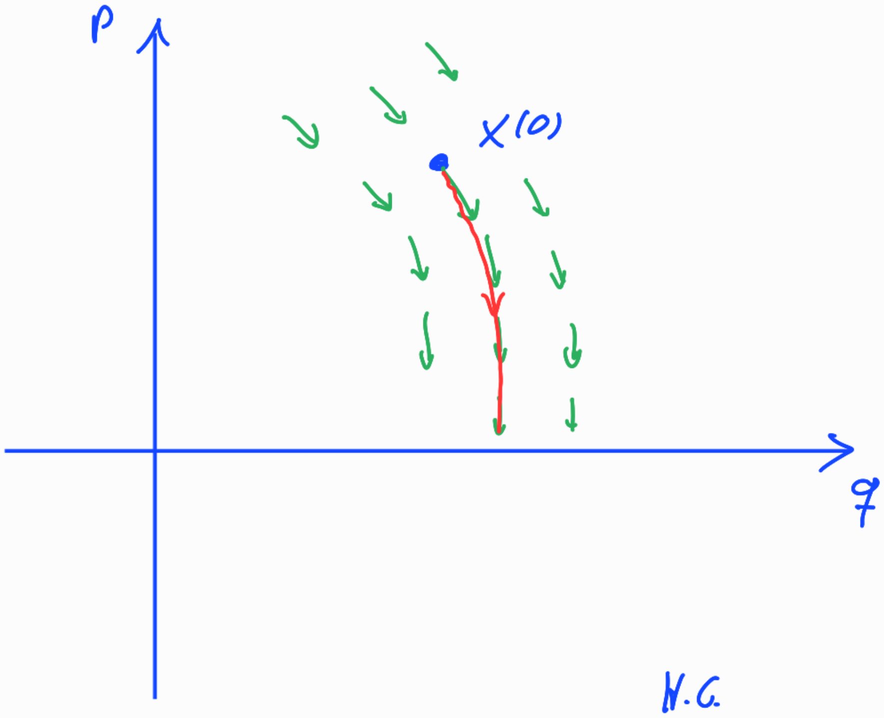
Γ Erinnerung: klassische Mechanik:

abgeschlossen, konservativ $\rightsquigarrow$ Hamiltonsche Mechanik

Hamilton-Fkt.

$$H(q,p) = p^2/2m + V(q) \rightsquigarrow \text{Dynamik?}$$

Zustand $X = (q, p)$; Hamilt.-Glen:



$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(q,p)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(q,p)$$

d.h. $$\dot{X}(t) = (\dot{q}(t), \dot{p}(t)) \overset{H.G.}{=} \underbrace{\left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial q}\right)}_{V_H(X(t))}\Bigg|_{\underbrace{q(t),p(t)}_{=X(t)}}$$

$$\rightarrow \quad \boxed{\dot{X}(t) \overset{!}{=} V_H(X(t))}$$

H ist Erzeuger der Zeit-entwicklung!

Bahn $X(t) \hat{=}$ Lösung der DGL

= Energie!

q. m. Dynamik:

Zustand $\psi(t) \in \mathcal{H}$

$$\hookrightarrow \quad \dot{\psi}(t) = f(\psi(t)) \quad \checkmark$$

3. Postulat (Kurzfassung)

Dynamik ist <u>linear</u>. $\hat{=}$ f lineare Abb:

Operator F

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

zu klären: 1) Anforderungen an F

2) physikalische Bedeutung von F

zu 1): Normerhaltung: $\|\psi(t)\| = 1$ für alle Zeiten t; $\psi(t)$ Lösg. der DGL (*)

$\psi(t) = \psi$

d. h. $0 \overset{!}{=} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 = \frac{d}{dt} \langle \psi, \psi \rangle = \langle \dot\psi, \psi \rangle + \langle \psi, \dot\psi \rangle$

$= \langle F\psi, \psi \rangle + \langle \psi, F\psi \rangle$

$\psi(t)$ Lsg der DGL $*$:

$\dot\psi = F\psi$

$= \langle \psi, F^+\psi \rangle + \langle \psi, F\psi \rangle$

$= \langle \psi, (F^+ + F)\psi \rangle = 0$ für $\psi(t)$ bel.

d. h. $F^+ + F \overset{!}{=} 0$ $(**)$

$\Rightarrow F^+ = -F$

(F anti-hermitesch)

Zweckmäßiger: $H := iF \rightarrow F = -iH$

$(**) \Leftrightarrow (-iH)^+ - iH = 0$

$\Leftrightarrow i(H^+ - H) = 0$ $H = H^+$

d. h. H hermitesch!

$\rightarrow$ dyn. GL: $\quad \dot{\psi}(t) = -iH\,\psi(t)$

wobei H hermitesch!

$$H \text{ hermitesch } \overset{?}{\underset{\uparrow}{=}} \underline{\underline{\text{Observable}}}$$

2. Postulat

2) betrachte

<u>zeitabhängige Erwartungswerte von Observablen</u>

$$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad A$$

$$\langle A\rangle_t := \langle A\rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t), A\,\psi(t)\rangle$$

$\llcorner$ gemäß dyn. GL

$\rightarrow$ <u>zeitliche Änderung</u>:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{d}{dt}\langle \psi, A\psi\rangle = \langle \underset{-iH\psi}{\dot{\psi}}, A\psi\rangle + \langle \psi, A\underset{-iH\psi}{\dot{\psi}}\rangle$$

$\psi(t) = \psi$: Lsg. von $\dot{\psi} = -iH\psi$

$$\rightsquigarrow \quad \frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \langle (-iH)\psi, A\psi\rangle + \langle \psi, A(-iH)\psi\rangle$$

$$= \langle \psi, iHA\psi\rangle + \langle \psi, -iAH\psi\rangle$$

$$(-iH)^+ = iH^+ = iH$$

$$= \langle \psi, i(\underbrace{HA - AH}_{=:[H,A]})\psi\rangle$$

Def:
- Kommutator zweier Op.en A und B

$$[A,B] := AB - BA$$

- A und B kommutieren (vertauschen) g.d.w. $AB = BA$ d.h. $[A,B]=0$

$$\rightsquigarrow \quad \frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \langle \psi, i[H,A]\psi\rangle\Big|_t$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \langle i[H,A]\rangle_t} \quad (*)$$

Def.:

A Erhaltungsgröße g.d.w. $\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = 0$

für $\psi(t)$

(*)

Satz: $\boxed{A \text{ Erhaltungsgröße} \iff [H, A] = 0}$

$\Rightarrow$ Observable H ist in jedem System Erhaltungsgröße da $[H, H] = 0$!

d.h. Observable $H \hat{=}$ Energie bis auf Faktor λ der Dimension Energie × Zeit = Wirkung!

$$\dot{\psi} = -i\frac{H}{\lambda}\psi$$

numerische Übereinstimmung mit Energie der kl. Mechanik: $\lambda = \frac{h}{2\pi} = \hbar = 1{,}04\ldots 10^{-34}\,Js$

3. Postulat (Dynamik)

Die Zeitentwicklung $\psi(t)$ des Zustands genügt der Schrödingergleichung

$$\dot{\psi}(t) = -i \frac{H}{\hbar} \psi(t) \quad ,$$

wobei der Hamilton-Operator H der Energie-Observablen entspricht.