Zusammenfassung: Die Postulate I – III der QM: (Dirac – von Neumann Axiome)

I Zustände eines phys. Systems werden durch normierte Vektoren eines komplexen Hilbertraumes dargestellt

II Observablen eines phys. Systems werden durch selbstadjungierte (hermitesche) Operatoren dargestellt. Den möglichen Meßwerte entsprechen die reellen Eigenwerte des Operators.

III Der Erwartungswert einer Observablen $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$ ist durch $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ gegeben.

3.2. Quantisierung revisited [Münster 4.5, Fließbach V.31]

Die im vorherigen Kapitel eingeführte mathematische Notation der QM verallgemeinert auf natürliche Weise die lineare Algebra endlicher dim. Vektorräume auf unendlichdimensionale Hilberträume. Diese sind Inhalt der Funktionalanalysis.

QM im Hilbertraum		Lineare Algebra
Zustände	Ket-Vektor $\|\psi\rangle$	Vektor $v \left(= \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ in best. Basis}\right)$
	bra-Vektor $\langle \psi\|$ (z.B. in x-Darst. $\langle x\|\psi\rangle = \psi(x)$)	Konjugiertes $v^\dagger \left(= (v_1^*, v_2^*, \dots)\right)$
	Skalarprodukt $\langle \psi \| \psi' \rangle$ $\left(= \sum_a \langle \psi\|a\rangle\langle a\|\psi'\rangle = \sum_a \psi(a)^* \psi'(a)\right.$ oder $\left.= \int dz \langle \psi\|z\rangle\langle z\|\psi'\rangle = \int dz\, \psi(z)^* \psi'(z)\right)$	Skalarprodukt $v^\dagger v' = v_1^* v_1' + v_2^* v_2' + \dots$
Observable	Operator $\hat{A}$	Matrix M
	selbstadjungiert $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ (hermitesch)	hermitesch $M^\dagger = M$

Eigenzustände (Eigenfunktionen) $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \Rightarrow a \in \mathbb{R}$

Eigenwerte $M v = \lambda v$

$M = M^\dagger \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$

Wellenfunktion in a-Darstellung

$\psi(a) = \langle a|\psi\rangle$

$\Rightarrow |\psi(a)|^2 = P_\psi(a)$

Elemente von v in der Basis, in der M diagonal ist:

$M = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$, $M\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$

d.h. $v_2 = (0,1,0,\ldots)\cdot v$, $\|v_2\|^2 = v^2$

Matrixelemente in b-Darstellung

$A_{bb'} = \langle b|\hat{A}|b'\rangle$

Matrixelemente von M in einer anderen Basis, in der M i.A. nicht diagonal ist M_{ij}

Unterschied: linke Seite kann ∞-dim sein, mit Funktionen als Vektoren

* 3 wichtige physikalische Observablen (in 3 Raum-dim)

Vektoriell:

$\hat{x}_i$: Komponenten des Ortsoperators $i = 1,2,3$

$\hat{p}_j$ " " Impulsoperators $j = 1,2,3$

Skalar: $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}})^2 + V(\vec{r}) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1,2,3} \hat{p}_i^2 + V(\vec{r})$

Hamiltonoperator

- Wie wir bereits gesehen haben, müssen wir wenn wir QM im Ortsraum betrachten den Impuls ersetzen durch $\vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla}$

dies ergab den Kommutator (Vertauschungsrel.) s. S. 9. $\boxed{[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}}$

als Quantisierungsvorschrift.

Zeigen wir nun, daß der eingeführte Hilbertraumformalismus zurück zur Schrödingerschen Wellenmechanik führt, wenn wir die Wellenfkt in Ortsdarstellung betrachten.

Betrachten wir der Einfachheit halber 1D d.h. $\hat{x}_i \to \hat{x}$, $\hat{p}_i \to \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Eigenzustände des Ortsoperators: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$

Normierung: $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$

Einheitsoperator $\hat{\mathbb{1}} = \int dx\, |x\rangle\langle x|$

Wellenfkt. $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

Skalarprodukt $\langle\psi'|\psi\rangle = \int dx\, \psi'(x)^* \psi(x)$

Ausgangspunkt: Eigenwertgl. für den Hamilton Op.;

$$\hat{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle \quad ; \quad |\cdot\langle x|,\ \text{Einschub von } \hat{\mathbb{1}}$$

$$\Rightarrow \langle x|\underset{\hat{\mathbb{1}}}{\hat{H}}|\psi_E\rangle = \int dx' \langle x|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})|x'\rangle\langle x'|\psi_E\rangle = E\langle x|\psi_E\rangle$$

• betrachte Polynome $V(x) = \sum_n c_n x^n$ (bzw. Taylorentwicklung):

$$\Rightarrow \underline{\langle x|V(\hat{x})|x'\rangle} = \langle x|\sum_n c_n(\hat{x})^n|x'\rangle = \sum_n c_n \langle x|(x')^n|x'\rangle$$

$$= V(x')\langle x|x'\rangle = \underline{V(x')\,\delta(x-x')} \quad (= V(x)\,\delta(x-x'))$$

• $\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle = \langle x|\hat{p}\underset{\hat{\mathbb{1}}}{\cdot}\hat{p}|x'\rangle = \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle$

→ Bestimmung der Matrixelemente $\langle x|\hat{p}|y\rangle$ aus der Vertauschungsrelation:

es gilt $\underline{i\hbar\,\delta(x-y)} = i\hbar\langle x|y\rangle = \langle x|i\hbar|y\rangle = \langle x|[\hat{x},\hat{p}]|y\rangle$

$= \langle x|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|y\rangle = \langle x|\hat{x}(\hat{p}|y\rangle) - \langle x|\hat{p}\hat{x}|y\rangle$

$= \langle \hat{x}^{\dagger} x|\hat{p}|y\rangle - \langle x|\hat{p}\,y|y\rangle$

Ortsop ist herm., damit Meßwerte reell

$= \langle x\, x|\hat{p}|y\rangle - y\langle x|\hat{p}|y\rangle = (x-y)\underline{\langle x|\hat{p}|y\rangle}$

Eigenwert reell　Zustand

Lösung von $\underline{(x-y)\langle x|\hat{p}|y\rangle = i\hbar\,\delta(x-y)}$?

* Definierende Eigenschaft der δ-Funktion:

- $\int dx\, x f(x)\,\delta(x) = 0\cdot f(0) = 0$ falls Testfunktion $f(x)$ regulär bei 0

  d.h. $\underline{\text{"}x\cdot\delta(x) = 0\text{"}}$

- $\int dx\, x f(x)\frac{d}{dx}\delta(x) = -\int dx\,\delta(x)\frac{d}{dx}[x f(x)]$ ← für verschwindende Randterme

  $= -\int dx\,\delta(x)(f(x) + x f'(x))$

  $= \int dx\, f(x)(-\delta(x)) - 0\cdot f'(0)$　f. f' regulär bei 0

(i.A. $f(0)\neq 0$)　d.h. $\underline{\text{"}x\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x)\text{"}}$

also erhalten wir folgende Lösung:　$\delta(x) = \delta(-x)$

$$\boxed{\langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-y)} = i\hbar\frac{d}{dy}\delta(x-y)$$

zurück zum 5. Schritt:

$\Rightarrow \int dx'\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int dx'\int dx''\langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle\,\psi(x')$

$= (-i\hbar)^2\int dx'\int dx''\left(\frac{d}{dx}\delta(x-x'')\right)\left(\frac{d}{dx''}\delta(x''-x')\right)\psi(x') = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$

$\frac{d}{dx''}$　$\delta(x'-x)$　2x part. Int.

$$\Rightarrow \langle x|\hat{H}|\psi_E\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle}_{} \psi_E(x') + \int dx' \langle x|V(\hat{x})|x'\rangle \psi_E(x')$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

das ist die zeitunabh. Schrödi.

Fazit: Unser neuer Formalismus impliziert die zeitunabh. Schrödi wenn wir die Orts darst. wählen. Wir könnten eine andere Darst. wählen, d.h. der neue Formalismus ist allgemeiner!

Q1 * Was ist mit der zeitabhängigen Schrödi?

Q2 * Wie erhalten wir in diesem Formalismus die Heisenbergsche Unschärfe relation?

zu Q2: In der Linearen Algebra wissen wir, daß wir 2 Matrizen die vertauschen gleichzeitig diagonalisieren können. Dasselbe gilt hier für Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ im Hilbertraum V:

$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$ (Nulloperator mit $\hat{0}|\psi\rangle = |0\rangle \; \forall |\psi\rangle \in V$)

$\Leftrightarrow$ $\hat{A}$ und $\hat{B}$ besitzen eine gemeinsame Basis aus Eigenzuständen, d.h. die Eigenwerte von $\hat{A}$ und $\hat{B}$ können unabh. voneinander genau bestimmt werden.

"$\Leftarrow$": Sei $|a,b\rangle$ bel. Eigenzustand von $\hat{A}$ und $\hat{B}$, mit Eigenwerten a und b; $\hat{A}|a,b\rangle = a|a,b\rangle$ und $\hat{B}|a,b\rangle = b|a,b\rangle$;

und damit gilt daß $[\hat{A},\hat{B}]|a,b\rangle = \underbrace{(ab - ba)}_{\text{Skalare vertauschen}}|a,b\rangle = 0$.

Aufgrund der Vollständigkeit bilden diese Eigenzustände eine Basis, in der bel. $|\psi\rangle \in V$ dargestellt werden können:

$|\psi\rangle = \sum_{a,b} c_{a,b}|a,b\rangle$ mit $c_{a,b} = \langle a,b|\psi\rangle$

$\Rightarrow \forall |\psi\rangle \in V$ gilt $[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle = 0$, d.h. es gilt die

Operator doch bildet $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$.

„$\Rightarrow$": Seien $|a, i\rangle$ die Eigenzustände von $\hat{A}$, d.h.

$\hat{A}|a, i\rangle = a\,|a, i\rangle$. Dann gilt wegen $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$

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

für alle diese Zustände

$$\hat{A}\left(\hat{B}|a, i\rangle\right) = (\hat{B}\hat{A} + \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{=\hat{0}})\,|a, i\rangle = a\,\hat{B}|a, i\rangle \text{ , d.h.}$$

$\hat{B}|a, i\rangle$ ist ebenfalls Eigenzustand zu $\hat{A}$ mit dem selben Eigenwert a.

Daher können wir $\hat{B}|a, i\rangle$ als Linearkombi aller a-Eigenzustände schreiben:

$$\hat{B}|a, i\rangle = \sum_j b_{ji}|a, j\rangle \quad \text{mit} \quad b_{ji} = \langle a, j|\hat{B}|a, i\rangle .$$

D.h. $\hat{B}$ wirkt wie eine Matrix auf der Basis $\{|a, i\rangle\}$ und kann diagonalisiert werden. In dieser neuen Basis $|a, b\rangle$ sind die Zustände ebenfalls Eigenzustände von $\hat{B}$. $\square$

- Wenn $\boxed{[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq \hat{0}}$ gilt ist eine gleichzeitige „Diagonalisierung" nicht möglich und die Eigenwerte von $\hat{A}$ und $\hat{B}$ können nicht unabh. voneinander bestimmt werden.

Für einen Zustand $|\Psi\rangle \in V$ definieren wir

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle\Psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\Psi\rangle \quad \text{Varianz von } \hat{A}$$

$$(\Delta B)^2 \equiv \langle\Psi|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2|\Psi\rangle \quad \text{" " } \hat{B}$$

In Ü7 werden wir zeigen daß $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle\Psi|\hat{C}|\Psi\rangle|$ gilt.

Insbesondere gilt dann wegen $[\hat{X}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\,\delta_{jk} \neq \hat{0}$

die Heisenbergsche Unschärferelation ($\hat{C} = \hbar\hat{\mathbb{1}}$, $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$).