

② Grundprinzipien der Quantenmechanik

Die Hauptschwierigkeit beim Studium der Quantenmechanik: ihre Grundgesetze können nicht aus Experimenten hergeleitet werden (oder zumindest wurden nicht so hergeleitet). Man kann ^{aber} (und hat tausendmal das gemacht) die Folgerungen experimentell überprüfen.

Hauptunterschied der Mikrowelt: jedes Experiment, jeder Versuch, die Eigenschaften eines Systems zu bestimmen, führt zu Einmischung in das System und zu Abänderung der zu untersuchenden Eigenschaften. Das führt zum Schluss, dass es Observablen gibt, die nicht gleichzeitig gemessen werden können.

Insbesondere kann man nicht ohne weiteres $f(a, b)$ für die nicht gleichzeitig messbaren Observablen definieren, also keine Summe $a+b$ oder kein Produkt ab .

Es macht aber Sinn, die Erwartung einer Observablen a in einem Zustand ω einzuführen, die durch $\langle a | \omega \rangle$ bezeichnet wird. Dann kann man annehmen:

$$a = b \Leftrightarrow \langle a | \omega \rangle = \langle b | \omega \rangle \text{ für alle Zustände } \omega$$

$$\omega_1 = \omega_2 \Leftrightarrow \langle a | \omega_1 \rangle = \langle a | \omega_2 \rangle \text{ für alle Observablen } a.$$

Man kann ferner $a+b$ definieren durch die Bedingung

$$\langle a+b | \omega \rangle = \langle a | \omega \rangle + \langle b | \omega \rangle \text{ für alle Zustände } \omega.$$

Das würde der Eigenschaft der Erwartungswerte entsprechen, ~~alle diese Eigenschaften zu erfüllen~~ ~~die~~ ~~gleichen~~ ~~Wirkung~~ ~~haben~~ ~~für~~ ~~alle~~ ~~Zustände~~. Freilich soll man nicht

$$\langle ab | \omega \rangle = \langle a | \omega \rangle \langle b | \omega \rangle$$

fordern, weil das für Erwartungswert nicht gilt. ③

man kann ein Produkt einführen:

$$a \circ b = \frac{(a+b)^2 - (a-b)^2}{4}$$

das allerdings kommutativ aber nicht assoziativ ist.
Wir werden weiterhin fordern (oder erwarten), dass \mathcal{A} eine Lie-Algebra ist, und dass die Relation der Lie-Operation mit der Dynamik erhalten bleibt: jede Observable H erzeugt eine 1-parametrische Familie von Automorphismen $U_t: A \rightarrow \mathcal{A}$, und $f_t = U_t f$ löst die Differentialgleichung

$$\frac{df_t}{dt} = \{H, f_t\}, \quad f_{t=0} = f$$

Ein faches („toy“)-Modell:

$\mathcal{A} = \{ \text{Selbstadjungierte Operatoren auf } \mathbb{C}^n \}$

Skalarprodukt in \mathbb{C}^n : $(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^n \xi_k \overline{\eta_k}$, mit

▷ $(\xi, \eta) = \overline{(\eta, \xi)}$

▷ $(\alpha \xi + \beta \eta, \zeta) = \alpha (\xi, \zeta) + \beta (\eta, \zeta)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

▷ $(\xi, \xi) > 0$ für $\xi \neq 0$

Lineare Operatoren: $\eta = A\xi \Leftrightarrow \eta_i = \sum_{k=1}^n A_{ik} \xi_k$ mit $A_{ik} = (Ae_k, e_i)$. In der Tat:

$$\eta_i = (A\xi, e_i) = \left(A \sum_{k=1}^n \xi_k e_k, e_i \right) = \sum_{k=1}^n (Ae_k, e_i) \xi_k$$

A^* adjungiert zu A , wenn

$$(A\xi, \eta) = (\xi, A^*\eta) \quad \forall \xi, \eta \in \mathbb{C}^n$$

Insbesondere

$$A^*_{ik} = (A^*e_k, e_i) = \overline{(e_i, A^*e_k)} = \overline{(Ae_i, e_k)} = \overline{A_{ki}}$$

A selbstadjungiert, falls $A^* = A \Leftrightarrow A_{ik} = \overline{A_{ki}}$. Es gilt:

$$(AB)^* = B^*A^*, \quad (\alpha A)^* = \overline{\alpha} A^*, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

$\mathcal{A} = \{ \text{selbstadjungierte Operatoren auf } \mathbb{C}^n \}$

$$A, B \in \mathcal{A} \Rightarrow A+B \in \mathcal{A}$$

$$\lambda \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda A \in \mathcal{A}$$

$$A \circ B = \frac{(A+B)^2 - (A-B)^2}{4} = \frac{AB+BA}{2} \in \mathcal{A}$$

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

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[\alpha A + \beta B, C] = \alpha [A, C] + \beta [B, C]$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

$$(= ABC - BCA - ABC - BAC + BAC - BCA)$$

$$\Rightarrow [A, B \circ C] = [A, B] \circ C + B[A, C],$$

Aber $[A, B] \notin \mathcal{A}$.

Allerdings: $\frac{i}{\hbar} [A, B] \in \mathcal{A} \quad \forall \hbar \in \mathbb{R}$

Zustände sind Funktionale auf \mathcal{A} , $\langle A | \omega \rangle$,
mit den Eigenschaften:

$$\langle \alpha A + \beta B | \omega \rangle = \alpha \langle A | \omega \rangle + \beta \langle B | \omega \rangle \quad , \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad \text{linear}$$

$$\langle A^2 | \omega \rangle \geq 0 \quad \text{positiv}$$

$$\langle \mathbb{1} | \omega \rangle = 1 \quad \text{normiert}$$

$$\langle A | \omega \rangle \in \mathbb{R} \quad \text{reellwertig}$$

solche Funktionale sind gegeben durch

$$\langle A | \omega \rangle = \text{tr}(MA)$$

wobei

- 1) $M^* = M$
- 2) $(M\xi, \xi) \geq 0$
- 3) $\text{tr}(M) = 1$.

Solche M heißen Dichtematrizen und spielen die Rolle von der Dichte $\rho(y)$ in der klassischen Mechanik.

Überprüfen:

$$\begin{aligned} 1) \text{tr}(AM) &= \overline{\text{tr}(AM)} = \sum_{i,j=1}^n \overline{A_{ij} M_{ji}} = \sum_{i,j=1}^n A_{ji}^* M_{ij}^* = \sum_{i,j=1}^n A_{ji} M_{ij}^* = \\ &= \text{tr}(AM^*) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \forall \text{ Operator } X = A_1 + iA_2, A_1, A_2 \in \mathcal{A} &\Rightarrow \text{tr}(XM) = \text{tr}(XM^*) \\ &\Rightarrow M^* = M; \end{aligned}$$

$$2) \text{tr}(A^2 M) \geq 0. \text{ Setze } A = P_\eta = \text{Projektor auf } \eta, \|\eta\|=1$$

sodass $P_\eta \xi = (\xi, \eta) \eta$. Dann

$$\text{tr}(P_\eta^2 M) = \text{tr}(P_\eta M) = (M\eta, \eta) \geq 0. \text{ Also } (M\eta, \eta) \geq 0$$

notwendig für Positivität des Funktionals. Auch hinreichend:

$$\text{tr}(A^2 M) = \text{tr}(AMA) = \sum_{i=1}^n (AMAe_i, e_i) = \sum_{i=1}^n (MAe_i, Ae_i) \geq 0.$$

$$3) \text{tr}(M) = 1 \Leftrightarrow 3) \text{-Eigenschaft des Funktionals}$$

Die Menge der Matrizen M mit 1)-3) ist konvex.
Sie enthält $P_\eta, \|\eta\|=1$:

$$1) (P_\eta \xi_1, \xi_2) = (\xi_1, \eta)(\eta, \xi_2) = \overline{(\xi_2, \eta)} (\xi_1, \eta) =$$

$$(\xi_1, P_\eta \xi_2) = (\xi_1, (\xi_2, \eta)\eta) = \overline{(\xi_2, \eta)} (\xi_1, \eta)$$

$$2) (P_\eta \xi, \xi) = (\xi, \eta)(\eta, \xi) = |(\xi, \eta)|^2 \geq 0 \quad 3) \text{tr}(P_\eta) = (\eta, \eta) = 1.$$

Wir zeigen, dass jeder M mit 1)-3) ist eine
 konvexe Kombination von P_2 . Wähle η_1, \dots, η_n als
 Eigenvektoren von M :

$$M\eta_i = \mu_i \eta_i, \quad \mu_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^n \mu_i = 1$$

Es sei $\xi = \sum_{i=1}^n (\xi, \eta_i) \eta_i$ die Entwicklung eines
 beliebigen ξ in dieser Basis, denn

$$M\xi = \sum_{i=1}^n \mu_i (\xi, \eta_i) \eta_i = \sum_{i=1}^n \mu_i P_{\eta_i} \xi \Rightarrow M = \sum_{i=1}^n \mu_i P_{\eta_i}$$

($\mu_i \geq 0, \sum_{i=1}^n \mu_i = 1$ -
 Konvexität).

VL3, 26.10.2010

Wir zeigen ferner, dass aus

$$P_2 = \alpha M_1 + (1-\alpha) M_2, \quad 0 < \alpha < 1,$$

folgt $M_1 = M_2 = P_2$ (d.h. der Zustand P_2 rein ist).

Es sei $H = \eta^\perp$, und nehme $\forall \xi \in H$. Dann

$$0 \leq \alpha (M_1 \xi, \xi) \leq \alpha (M_1 \xi, \xi) + (1-\alpha) (M_2 \xi, \xi) =$$

$$= (P_2 \xi, \xi) = 0$$

Es folgt $M_1 \xi = 0$ (in der Tat, für positiven
 Operator A es gilt

$$0 \leq (A(\alpha \xi + \beta \eta), \alpha \xi + \beta \eta) = (A\xi, \xi) \alpha^2 + (A\xi, \eta) \alpha \beta + (A\eta, \xi) \alpha \beta + (A\eta, \eta) \beta^2$$

$$\Rightarrow |(A\xi, \eta)|^2 \leq (A\xi, \xi) (A\eta, \eta), \text{ daher } (A\xi, \xi) = 0 \Rightarrow A\xi = 0.$$

Also $(M_1 \xi, \xi) = 0 \quad \forall \xi \Rightarrow (\xi, M_1 \xi) = 0 \quad \forall \xi \Rightarrow$
 $\forall \xi \in H = \eta^\perp$

$$\Rightarrow M_1 \xi \parallel \eta \Rightarrow M_1 \xi = c_\xi \eta, \text{ insbesondere } M_1 \eta = c_\eta \eta.$$

$\forall \xi: \xi = (\xi, \eta) \eta + \xi, \quad \xi \in H \Rightarrow M_1 \xi = c_\eta (\xi, \eta) \eta = c_\eta P_2 \xi$
 $\Leftrightarrow M_1 = c_\eta P_2$. Aus $\text{tr}(M_1) = 1$ folgt $c_\eta = 1, M_1 = P_2$. Analog $M_2 = P_2$.

Also: P_η sind reine Zustände. Auch die Umkehrung gilt: ist M ein reiner Zustand, so gilt $M = P_\eta$ mit $\|\eta\| = 1$.

Merke: die Zuordnung η mit $\|\eta\| = 1 \mapsto P_\eta$ ist nicht 1-zu-1. In der Tat, $\eta' = e^{i\theta} \eta$, $\theta \in \mathbb{R} \Rightarrow P_{\eta'} = P_\eta$. Also die reinen Zustände entsprechen den Klassen von Vektoren mit Norm 1, die untereinander durch $\eta' = e^{i\theta} \eta$ verbunden sind.

Heisenbergs Unschärferelation.

Wir betrachten zwei Observablen A, B in einem Zustand ω . Varianz:

$$\sigma_\omega^2(A) = \langle (A - E_\omega(A))^2 | \omega \rangle = \langle A^2 | \omega \rangle - \langle A | \omega \rangle^2$$

" $\langle A | \omega \rangle$ "

Satz.

$$\sigma_\omega(A) \sigma_\omega(B) \geq \frac{\hbar}{2} | \langle \{A, B\}_h | \omega \rangle |$$

Beweis. Wir haben im klassischen Fall gezeigt:

$$\sigma_\omega^2 A \geq \alpha \sigma_{\omega_1}^2 A + (1-\alpha) \sigma_{\omega_2}^2 A, \text{ sobald } \omega = \alpha \omega_1 + (1-\alpha) \omega_2$$

Derselbe Beweis funktioniert im Quantenfall, da dann kein Bezug auf die Realisierung der Observablenalgebra genommen wird. Es folgt

$$\sigma_\omega^2 A - \sigma_\omega^2 B \geq (\alpha \sigma_{\omega_1}^2 A + (1-\alpha) \sigma_{\omega_2}^2 A) (\alpha \sigma_{\omega_1}^2 B + (1-\alpha) \sigma_{\omega_2}^2 B)$$

$$\geq (\alpha \sigma_{\omega_1} A \sigma_{\omega_1} B + (1-\alpha) \sigma_{\omega_2} A \sigma_{\omega_2} B)^2, \text{ da}$$

$$\sigma_{\omega_1}^2 A \sigma_{\omega_1}^2 B + \sigma_{\omega_2}^2 A \sigma_{\omega_2}^2 B \geq 2 \sigma_{\omega_1} A \sigma_{\omega_2} A \sigma_{\omega_1} B \sigma_{\omega_2} B$$

(arithm. Mittel \geq geom. Mittel). Also

$$\sigma_\omega A \sigma_\omega B \geq \alpha \sigma_{\omega_1} A \sigma_{\omega_1} B + (1-\alpha) \sigma_{\omega_2} A \sigma_{\omega_2} B$$

$$\geq \min(\sigma_{\omega_1} A \sigma_{\omega_1} B, \sigma_{\omega_2} A \sigma_{\omega_2} B)$$

Also reicht es aus, die Ungleichrelation für reine Zustände zu beweisen. Im reinen Zustand $w = P_2$ mit $\|y\|=1$ hat man

$$\langle A|w\rangle = \text{tr}(AP_2) = (A_{2,2})$$

jetzt:

$$\langle (A+i\alpha B)_2, (A+i\alpha B)_2 \rangle \geq 0, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad \|y\|=1$$

$$\downarrow$$

$$\langle A^2|w\rangle + i\alpha \langle (AB-BA)|w\rangle + \alpha^2 \langle B^2|w\rangle \geq 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \langle A^2|w\rangle - \alpha h \langle \{A,B\}_s |w\rangle + \alpha^2 \langle B^2|w\rangle \geq 0 \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\langle A^2|w\rangle \langle B^2|w\rangle \geq \frac{h^2}{4} \langle \{A,B\}_s |w\rangle^2}$$

Hier kann man A durch $A - \langle A|w\rangle$, B durch $B - \langle B|w\rangle$ ersetzen.

Keine Einschränkungen für vertauschbare A, B ! Wir werden sehen, dass man solche Observablen auch tatsächlich (theoretisch) gleichzeitig messen kann. Wenn $\{A,B\}_s = \text{const} \neq 0$, gibt es keine Zustände in denen die Varianzen von beiden Observablen verschwinden.

Merke: In der Quantenmechanik die reinen Zustände sind nicht die Zustände mit verschwindender Varianz!

Physikalische Bedeutung der EW und EV von Observablen

Verteilungsfunktion von Observabler A im Zustand w :

$$w_A(x) = \langle \theta(x-A) |w\rangle, \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

Funktionen von Operatoren: ist (ψ_1, \dots, ψ_n) die EV Basis von (selbstadjungierten) Operator A ,

so gilt

$$A\psi_i = a_i\psi_i, \quad i=1, \dots, n,$$

$$f(A)\psi_i = f(a_i)\psi_i$$

In anderen Worten,

$$A = \Phi \operatorname{diag}(a_1, \dots, a_n) \Phi^{-1} \rightarrow$$

$$f(A) = \Phi \operatorname{diag}(f(a_1), \dots, f(a_n)) \Phi^{-1}$$

Insbesondere wenn $f(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda^k$, dann $f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$.

Aber die Definition funktioniert auch für die multiplizierte f , sodass, z.B. im Falle dass alle EW a_i einfach sind, $a_1 < \dots < a_n$

$$\Theta(\lambda - A) \varphi_j = \Theta(\lambda - a_j) \varphi_j = \begin{cases} \varphi_j, & \lambda \geq a_j \\ 0, & \lambda < a_j \end{cases}$$

$$= \sum_{a_i \leq \lambda} P_{\varphi_i} \varphi_j \quad (\text{da } P_{\varphi_i} \varphi_j = \delta_{ij} \varphi_j)$$

Wir haben also gezeigt:

$$\Theta(\lambda - A) = \sum_{a_i \leq \lambda} P_{\varphi_i}$$

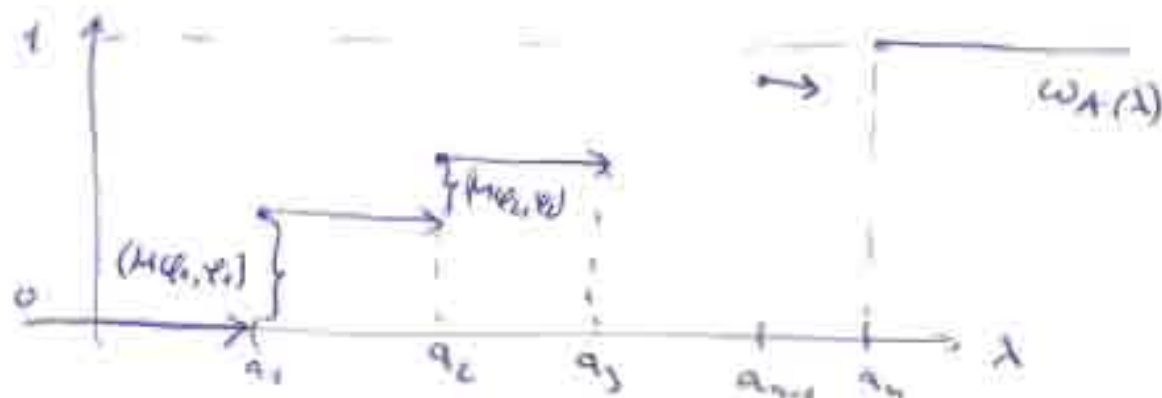
Es ist offensichtlich: $P_{\lambda} A = \Theta(\lambda - A)$ ist ein Projektor, d.h.

$$(P_{\lambda}(A))^2 = P_{\lambda}(A) = P_{\lambda}^2(A)$$

(Spektralprojektor von A); $P_{\lambda}(A) = 0$ für $\lambda < a_1$
und $P_{\lambda}(A) = I$ für $\lambda \geq a_n$.

Jetzt können wir die Verteilungsfunktion berechnen:

$$\begin{aligned} \omega_{\lambda}(A) &= \langle P_{\lambda}(A) | \omega \rangle = \operatorname{tr} P_{\lambda}(A) M = \operatorname{tr} \sum_{a_i \leq \lambda} P_{\varphi_i} M \\ &= \sum_{a_i \leq \lambda} (M \varphi_i, \varphi_i) \end{aligned}$$



Also: die Wahrscheinlichkeiten, dass der Wert von A gleich λ ist, ist höchstens verschwindend, nur wenn $\lambda \in \{a_1, \dots, a_n\}$, und zwar gleich

$$w_i = (M \varphi_i, \varphi_i) \quad \text{für } \lambda = a_i.$$

man hat $\sum_{i=1}^n w_i = \sum_{i=1}^n (M \varphi_i, \varphi_i) = \text{tr } M = 1.$

In einem reinen Zustand mit $M = P_{\varphi}$ hat man

$$w_i = |\langle \varphi, \varphi_i \rangle|^2, \quad i=1, \dots, n.$$

In reinen Zustand mit $M = P_{\varphi_j}$, der einer der EV der Observable A entspricht, gilt

$$w_i = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$

In diesem Zustand also das Messergebnis von A ist mit Wahrscheinlichkeit 1 gleich a_j .

Hausaufgabe. Zeige:

$$w_{f(A)}(\lambda) = w_A(f^{-1}([-\infty, \lambda]))$$

und, allgemeiner,

$$w_{f(A)}(E) = w_A(f^{-1}(E)).$$

Dieselbe Formel wie im klassischen Fall!

Zusammenfassung

1) Eine Observable A im Zustand $w \Rightarrow M$ hat die Erwartung

$$\langle A | w \rangle = \text{tr } M A$$

und die Verteilungsfunktion

$$w_A(\lambda) = \text{tr } M P_A(\lambda)$$

Im reinen Zustand $M = P_{\varphi}$, $\|\varphi\|=1$, man hat

$$\langle A | w \rangle = \langle A \varphi, \varphi \rangle$$

$$w_A(\lambda) = \langle P_A(\lambda) \varphi, \varphi \rangle$$

2) Die Menge von EV der Observable A ist die Menge der möglichen Ergebnisse der Messung dieser Observable.

3) Die Wahrscheinlichkeit, den Wert a_i bei der Messung von A zu bekommen, ist gleich

$$w_i = \langle M\psi_i, \psi_i \rangle \quad \text{bzw.} \quad \sum_{k=1}^r \langle M\psi_i^{(k)}, \psi_i^{(k)} \rangle$$

wenn die Dimension des i -ten Eigenraumes gleich r ist,

und in einem reinen Zustand $M = P_{\psi}$, $\|\psi\| = 1$,

$$w_i = |\langle \psi, \psi_i \rangle|^2 \quad \text{bzw.} \quad \sum_{k=1}^r |\langle \psi, \psi_i^{(k)} \rangle|^2.$$

4) Eigenvektoren einer Observablen A bestimmen die reinen Zustände, in denen die Observable mit Sicherheit den entsprechenden EW annimmt.

Dies zeigt sofort die eingeschränkte Bedeutung unseres "toy model" an: es beschreibt (kann beschreiben) nur Observablen mit s_n Werten, also keine Observablen mit ∞ Werten oder einer kontinuierlichen Wertemenge. Dies wird überwunden, wenn wir statt \mathbb{C}^n einen Hilbertraum als Zustandsraum nehmen und unbeschränkte (selbstadjungierte) Operatoren als Observablen zulassen.

Zwei Beschreibungen der Dynamik in der Quantenmechanik.

VL 4, 28.10.2010

1) Heisenbergsches Bild

Zustände $\omega \mapsto M$ sind konstant: $\frac{dM}{dt} = 0$,
Observablen evolvieren nach

$$\frac{dA(t)}{dt} = \{H, A(t)\}_h$$

Diese Gleichung, mit AW $A(0) = A_0$, liefert (wie in der klassischen Mechanik) eine 1-parametrische Familie von Automorphismen von \mathcal{A} :

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = U^{-1}(t) A U(t).$$

(und direkt überprüft).

Hier: $U(t) = e^{-iHt}$, $U^* = e^{iHt} = U^\dagger(t)$,
 sodass $U(t)$ sind unitär (weil H selbstadjungiert);
 heißt Evolutionsoperator - Gruppen eigenschaft:

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1+t_2) = U(t_2)U(t_1)$$

$$U^{-1}(t) = U(-t)$$

Erwartungswert:

$$\langle A(t) | \omega \rangle = \text{tr } A(t)M.$$

Sind H, A vertauschbar, so gilt $[H, A]_h = 0$, $A(t) = A$,
 $\langle A(t) | \omega \rangle = \langle A | \omega \rangle = \text{const.}$

2) Schrödingers Bild

$$\begin{aligned} \langle A(t) | \omega \rangle &= \text{tr } U^\dagger(t) A U(t) M = \text{tr } A U(t) M U^\dagger(t) \\ &= \text{tr } A M(t) = \langle A | \omega(t) \rangle, \end{aligned}$$

wobei

$$\omega(t) \leftrightarrow M(t) = U(t) M U^\dagger(t),$$

sodass $M(t)$ die eindeutige Lösung von

$$\frac{dM}{dt} = -i[H, M(t)]_h, \quad M(0) = M$$

ist. Dabei $\frac{dA}{dt} = 0$.

Die Zeitabhängigkeit der reinen Zustände:

$$P_\psi(t) = U(t) P_\psi U^\dagger(t) \quad (R2)$$

Wir zeigen, dass man annehmen kann:

$$P_\psi(t) = P_\psi(t_0) \quad \text{mit } \psi(t_0) = U(t) \psi$$

(kann nicht aus (R2) folgen, da der Zustandsvektor nur bis auf $\times e^{i\varphi}$ definiert ist; wird aber immer angenommen):

$$\begin{aligned} P_\psi(t) \xi &= (\xi, \psi(t)) \psi(t) = (\xi, U(t) \psi) U(t) \psi = U(t) (U^\dagger(t) \xi, \psi) \psi \\ &= U(t) P_\psi U^\dagger(t) \xi = P_\psi(t) \xi; \end{aligned}$$

$\|\psi(t)\| = \|\psi\| = 1$, da $U(t)$ unitär. Der Vektor $\psi(t)$ genügt der Schrödingers Gleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t).}$$