QM	Lineare Algebra
Zustände: ket-Vektoren $\lvert\psi\rangle$	Vektoren $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$
bra-Vektoren $\langle\psi\rvert$	konjugierte Vektoren $v^\dagger = (v_1^*, v_2^*, \dots)$
Skalarprodukt $\langle\psi\vert\psi\rangle$	Skalarprodukt $v^\dagger v' = v_1^* v_1' + v_2^* v_2' + \dots$
Observablen: Operator $\hat{A}$	Matrix M
"hermitesch" $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$	hermitesch $M^\dagger = M$
Eigenzustände $\hat{A}\lvert a\rangle = a\lvert a\rangle$, $a \in \mathbb{R}$	$Mv = \lambda v$, $\lambda \in \mathbb{R}$
Wellenfkt in a-Darst. $\psi(a) = \langle a\vert\psi\rangle$	Elemente von v in einer Basis, in der M diagonal ist, $M = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$, $M\begin{pmatrix}0\\1\\\vdots\end{pmatrix} = \lambda_2\begin{pmatrix}0\\1\\\vdots\end{pmatrix}$: $v_i = (01\dots)v$
Matrixelemente in b-Darst. $A_{bb'} = \langle b\vert\hat{A}\vert b'\rangle$	Elemente von M in einer anderen Basis

3.2 Kommutatoren und Quantisierung

wollen jetzt Physik mit dieser neuen Notation betreiben!

betrachte 3 Observablen:

$$\text{Ortsoperator} \equiv \hat{r}_i$$
$$\text{Impulsoperator} \equiv \hat{p}_j$$
$$\text{Hamilton-Op.} \equiv \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

die korrekte Physik folgt aus einer Verallgemeinerung der Vertauschungsrelation von S. 8:

$$\boxed{[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{"Quantisierung"}}$$

Zunächst überzeugen wir uns, dass dieser Formalismus zurück zur Wellenmechanik führt, falls wir die Wellenfkt in Ortsdarstellung betrachten.

hier: bleiben in 1D, $\hat{r}_i \to \hat{x}$, $\hat{p}_j \to \hat{p}$

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

Normierung: $\langle x\vert x'\rangle = \delta(x-x')$ ((bzw. $\delta_{xx'}$, falls regularisiert))

Einheitsoperator: $\hat{\mathbb{1}} = \int dx \, \lvert x\rangle\langle x\rvert$ ((bzw. $\sum_x \lvert x\rangle\langle x\rvert$, "))

Wellenfunktion: $\psi(x) = \langle x\vert\psi\rangle$

Ausgangspunkt ist die Eigenwert-Gleichung für den Hamilton-Op. (vgl. S. 12):

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad ; \quad \text{von links mit } \langle x| \text{ multiplizieren,} \quad \mathbb{1} = \int dx'\, |x'\rangle\langle x'| \text{ einfügen}$$

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

auf der LHS ist $\langle x| V(\hat{x}) |x'\rangle = \langle x| \sum_n c_n (\hat{x})^n |x'\rangle = \langle x| \sum_n c_n (x')^n |x'\rangle$

$$= \langle x| V(x') |x'\rangle = V(x') \langle x|x'\rangle = V(x)\,\delta(x-x')$$

sowie $\quad \langle x|\hat{p}^2|x'\rangle = \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle$

→ brauchen hierfür Matrixelemente $\langle x|\hat{p}|y\rangle$.

→ benutze Vertauschungsrelationen

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

$$\langle x| \hat{x}\hat{p} |y\rangle = \langle x|\hat{x}\phi\rangle = \langle \hat{x}^\dagger x|\phi\rangle = \langle \hat{x} x|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{x} x\rangle]^* = x \langle x|\hat{p}|y\rangle$$

$$\Rightarrow (x-y) \langle x|\hat{p}|y\rangle = i\hbar\,\delta(x-y)$$

[brauchen zur Lsg dieser Glg. Eigenschaften der δ-Fkt:

$$\int dx\, f(x)\, x\,\delta(x) = 0 \cdot f(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{"} x\,\delta(x) = 0 \text{"}$$

$$\int dx\, f(x)\, x\,\partial_x \delta(x) = -\int dx\, \delta(x)\, \partial_x [x f(x)]$$

$$= \int dx\, f(x) [-\delta(x)] - 0 \cdot f'(0) \quad \Rightarrow \quad \text{"} x\,\partial_x \delta(x) = -\delta(x) \text{"}$$

]

$$\Rightarrow \quad \langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar\,\partial_x \delta(x-y) \quad \text{ist eine Lsg}$$

→ also (LHS): $\int dx' \langle x|\hat{p}^2|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle \psi(x')$

$$= \int dx' \int dx'' (-i\hbar)^2 [\partial_x \delta(x-x'')][\partial_{x''} \delta(x''-x')] \psi(x')$$

$$\text{PI} \quad \overset{\leftarrow}{=} -\overset{\leftarrow}{\partial}_{x''} = +\overset{\leftarrow}{\partial}_x$$

$$= -\hbar^2 \partial_x^2 \int dx' \int dx'' \delta(x-x'')\,\delta(x''-x')\,\psi(x') = -\hbar^2 \partial_x^2 \psi(x)$$

Insgesamt also $\quad \langle x|\hat{H}|\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \quad \blacksquare$

Bem: • der neue Formalismus enthält also die alte (zeitunabhängige; aber sogar die zeitabhängige, s. § 3.3) Schrödinger-Glg.

• neuer Formalismus ist aber <u>allgemeiner</u>: Ortsdarstellung ist nur ein Spezialfall.

Rolle der Heisenberg'schen Unschärferelation im allg. Formalismus?

Satz: Seien $\hat{A}, \hat{B}$ zwei Observablen mit $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{0}$

$\Leftrightarrow$ $\hat{A}, \hat{B}$ haben gleichzeitige Eigenzustände

und können daher beliebig genau gemessen werden.

Bew: "$\Leftarrow$" $[\hat{A},\hat{B}]|a,b\rangle = (ab-ba)|a,b\rangle = 0$ für jeden Zustand $|a,b\rangle$

wegen Vollständigkeit kann ein allg. Zustand als

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

$\Rightarrow [\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle = 0 \quad \forall\, |\psi\rangle \quad \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = \hat{0}$

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

$\Rightarrow \hat{A}\hat{B}|a,i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a,i\rangle = a\,\hat{B}|a,i\rangle$

$\Rightarrow \hat{B}|a,i\rangle$ sind EZ von $\hat{A}$ mit demselben EW

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

also operiert $\hat{B}$ wie eine Matrix auf die $|a,i\rangle$;

diese Matrix kann diagonalisiert werden;

damit bekommen wir Kombinationen, die auch EZ von $\hat{B}$ sind: $|a,b\rangle$ ∎

Falls andererseits $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C} \neq \hat{0}$:

→ gleichzeitige Bestimmung ist nicht möglich.

→ für gegebenen Zustand $|\psi\rangle$ definieren wir die Varianzen

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle\psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2|\psi\rangle$$

$$(\Delta B)^2 \equiv \langle\psi|(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)^2|\psi\rangle$$

→ es gilt $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|$ (Beweis: Ü16)

Bem: • Kommutatoren zwischen Observablen

(verschwindend, s.o., oder nicht, s. S.30)

spielen eine zentrale Rolle in der QM