

Quantenmechanik

Vorlesungsnotizen zum Kurs von A. Hebecker von 2025
(basierend auf Kursen von 2018 und 2019)

Diese Vorlesung wird besonders stark durch die Bücher [1–3] und die Skripte [4, 5] beeinflusst werden. Es gibt natürlich eine sehr große Zahl verschiedenartiger, ausgezeichneter Lehrbücher (z.B. [6–14] und für tiefere mathematische Aspekte [15–18]), die ich zum Teil auch benutzen werde. Es wird leider nicht immer möglich sein, auf die beste Herleitung und das beste weiterführende Buch zu einem gewissen Thema zu verweisen. Bitte suchen Sie selbst mit!

Inhaltsverzeichnis

1	Materiewellen und Schrödingergleichung	2
1.1	Motivation	2
1.2	Materiewellen	3
1.3	Schrödingergleichung	5
1.4	Die neue Weltsicht der Quantenmechanik	7
1.5	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	10
1.6	Erwartungswerte von Observablen	12
2	Das 2-Zustands-System und andere endlich-dimensionale Modelle	14
2.1	Zwei- und Mehr-Zustands-Systeme	15
2.2	Endlichdimensionale komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt	16
2.3	Erste Schritte zur Physik des Zwei-Zustands-Systems	19
2.4	Adjungierte und Hermitesche Operatoren	22
2.5	Eigenwerte, Diagonalisierbarkeit, unitäre Operatoren	25

1 Materiewellen und Schrödingergleichung

1.1 Motivation

Die Quantenmechanik ist experimentell motiviert. Mir ist kein überzeugendes theoretisches Argument bekannt, aus dem sie (gegeben z.B. ein gutes Verständnis der klassischen Mechanik und Feldtheorie) abgeleitet werden könnte.

Dass etwas mit dem rein klassischen Weltbild ‘nicht stimmt’ kann man aber durchaus theoretisch argumentieren: Betrachten wir dazu z.B. einen evakuierten Hohlraum. Dessen Freiheitsgrade sind die darin anregbaren stehenden elektromagnetischen Wellen. Der Gleichverteilungssatz behauptet nun, dass im thermodynamischen Gleichgewicht jedem Freiheitsgrad die gleiche mittlere Energie zukommt. Wegen des Vorhandenseins beliebig kurzer Wellenlängen gibt es in unserem Fall unendlich viele solcher Freiheitsgrade. Demnach würde der Hohlraum bei Kontakt mit einem Wärmebad pro Freiheitsgrad $kT/2$ und somit unendlich viel Energie aufnehmen (**UV Katastrophe**). Natürlich könnte man an dieser Stelle versuchen, die Grundannahmen der statistischen Mechanik anzuzweifeln. Man lernt auch nicht, *wie* die Theorie zu modifizieren ist, um diese Schwierigkeit zu überwinden.

Ein anderes Problem der rein klassischen Physik ist die divergierende Selbstenergie bzw. Selbstwechselwirkung des Elektrons (**self-force, radiation-reaction, Abraham-Lorentz force**). Dieses Problem hat zwei Aspekte: Einerseits divergiert die Energie, also letztlich die Masse, wenn man von einer kontinuierlichen Ladungsverteilung ausgeht und diese auf einen Punkt konzentriert. Andererseits findet man akausales Verhalten und sogenannte ‘Runaway solutions’, die in etwa einer Beschleunigung des Elektrons durch sein eigenes Feld entsprechen. Einige Bemerkungen dazu finden sich in [19, 20] (siehe auch http://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_28.html und https://en.wikipedia.org/wiki/Abraham-Lorentz_force). Es sind dies allerdings Probleme der klassischen Feldtheorie, nicht der klassischen Mechanik. Sie werden dementsprechend erst im Rahmen der Quantenfeldtheorie gelöst.

Aber, wie schon gesagt, die obigen Versuche der theoretischen Motivation sind sekundär gegenüber der direkten experimentellen Evidenz. Einige dieser historisch wichtigen **experimentellen Befunde** waren:

(1) Quantisierung (der Energie) des Lichts gemäß

$$E = \hbar\omega, \tag{1.1}$$

wie sie z.B. aus dem photoelektrischen Effekt folgt.

(2) Die Stabilität und Energiequantisierung des H-Atoms.

(3) Das Stern-Gerlach-Experiment (Spin-Quantisierung).

(4) Das Doppelspalt-Experiment.

Von diesen ausgehend wollen wir nun möglichst einfach und anschaulich zu den zentralen theoretischen Ideen gelangen und anschließend die Theorie selbstkonsistent entwickeln.

Dazu wollen wir uns $E = \hbar\omega$ (was sich als zentral erweisen wird) merken, aber von den Photonen Abstand nehmen. Diese sind die Quanten des elektromagnetischen Feldes und ein

echtes Verständnis würde dessen Quantisierung (also die Entwicklung der Quantenfeldtheorie) erfordern. Das ist uns im Moment zu kompliziert. Stattdessen betrachten wir nichtrelativistische (Punkt-)Teilchen, speziell das Doppelspaltexperiment.

1.2 Materiewellen

Der Befund des Doppelspaltexperiments sollte vertraut sein: Teilchenstrahlen interferieren wie Wellen, insbesondere auch (oder gerade dann) wenn die Intensität so klein ist, dass zu jedem gegebenen Zeitpunkt nur ein Elektron in der Anordnung ist (Abb. 1).

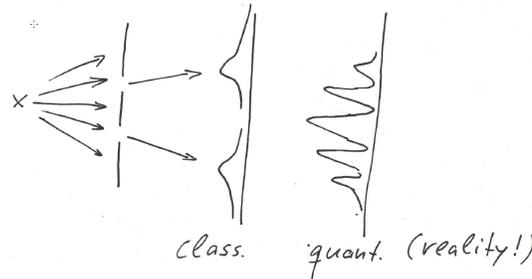


Abbildung 1: Doppelspaltexperiment.

Sie sollten sich jetzt erinnern, wie das Doppelspaltexperiment mit (klassischem) Licht oder Wasserwellen mathematisch beschrieben wird. Das übertragen wir auf unsere zu entwickelnde Theorie und lernen somit:

(1) Teilchen werden durch Wellen beschrieben:

$$\psi(\vec{x}, t) \sim e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}. \quad (1.2)$$

(2) Das Superpositionsprinzip gilt: $\psi_{ges.} = \psi_1 + \psi_2$.

(3) Die Intensitätskurve auf dem Schirm entspricht der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens, welche demnach (damit unsere Wellen-Interpretation funktioniert) durch das Betragsquadrat der Amplitude gegeben ist:

$$\text{Aufenthaltswahrscheinlichkeit} \sim |\psi(\vec{x}, t)|^2. \quad (1.3)$$

Klarerweise ist der experimentelle Input eigentlich detaillierter, als wir es hier darstellen. Man könnte z.B. rein qualitativ ein ähnliches Bild erhalten, wenn man in der letzten Formel $|\psi|^\alpha$ mit $\alpha \neq 2$ schreiben würde. Aber das ist nicht, was die Daten sagen. Man könnte auch versuchen, mit einer reellen (Sinus-)Welle zu arbeiten. Aber dann gäbe es Stellen entlang der Ausbreitungsrichtung des Strahls, an denen der Sinus verschwindet und wo demnach das Teilchen nie sein kann. Das ist zumindest unschön. Wir behaupten hier nicht, (1) bis (3) in einem mathematischen Sinne abgeleitet zu haben – wir haben aber eine sehr einfache und überzeugende Motivation.

Wir akzeptieren die obigen Schlussfolgerungen aus dem Doppelspaltexperiment, nehmen noch $E = \hbar\omega$ hinzu und argumentieren jetzt als Theoretiker: Zunächst bemerken wir, dass den

drei Parametern \bar{p} , welche die Bewegung des Teilchens charakterisieren (also seinem Impuls), die 4 Parametern \bar{k} und ω der Welle gegenüberstehen.¹ Wir erwarten, dass sich dies mathematisch durch Funktionen $\bar{k} = \bar{k}(\bar{p})$ und $\omega = \omega(\bar{p})$ darstellen lässt. Außerdem wird man i.A. die erste Beziehung auch zu $\bar{p} = \bar{p}(\bar{k})$ invertieren können. Damit ließe sich dann auch $\omega = \omega(\bar{p}(\bar{k}))$ bzw. $\omega = \omega(\bar{k})$ (Dispersionsrelation) schreiben. Die genauen Formeln wollen wir jetzt herleiten.

Dazu beschreiben wir ein Teilchen, welches räumlich lokalisiert ist, als **Wellenpaket**:

$$\psi(\bar{x}, t) = \int d^3k f_{\bar{k}_0}(\bar{k}) e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega(\bar{k})t)}. \quad (1.4)$$

Hier ist $f_{\bar{k}_0}$ eine Funktion, die bei \bar{k}_0 ihr Maximum hat und davon entfernt schnell abfällt (z.B. eine 3d Gauß-Kurve). Dann ist ψ bei $t = 0$ die Fourier-Transformierte von f und somit ebenfalls eine Gauß-Kurve, beschreibt also ein lokalisiertes Teilchen mit Impuls ungefähr gleich \bar{k}_0 .

Die Geschwindigkeit, mit der sich das Wellenpaket (also das Teilchen) bewegt, ist die **Gruppengeschwindigkeit**

$$\bar{v} = \nabla_{\bar{k}} \omega. \quad (1.5)$$

Des Weiteren haben wir

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\bar{p}^2}{2m\hbar}. \quad (1.6)$$

Wir nehmen $\bar{p} = \bar{p}(\bar{k})$ an und rechnen:²

$$\frac{p_i}{m} = v_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i} = \frac{\partial \omega}{\partial p_j} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial k_i} = \frac{p_j}{m\hbar} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial k_i}. \quad (1.7)$$

Es muss also $\partial p_j / \partial k_i = \delta_{ij} \hbar$ und somit

$$\bar{p} = \hbar \bar{k} \quad (1.8)$$

gelten. Die Dispersionsrelation ist

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} \bar{k}^2. \quad (1.9)$$

Jetzt kommen wir zur einzelnen, unendlich ausgedehnten Welle,

$$\psi(\bar{x}, t) \sim e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega(\bar{k})t)}, \quad (1.10)$$

zurück und stellen fest, dass sie offensichtlich die Differentialgleichung

$$-i\hbar \nabla \psi(\bar{x}, t) = \bar{p} \psi(\bar{x}, t) \quad (1.11)$$

¹Wir sehen dabei von den drei weiteren Parametern \bar{x} , welche den Ort des Teilchens beschreiben, ab. Wir versuchen hier in gewisser Weise den homogenen Teilchenstrom mit der ebenen Welle zu identifizieren. Zur räumlichen Lokalisierung kommen wir gleich.

²Sie wissen natürlich, dass die x^i als Koordinaten einen oberen Index haben. Demnach haben die $v^i = \dot{x}^i$ auch einen oberen Index. Die Impulse $p_i = \partial L / \partial \dot{x}^i$ haben damit einen unteren Index. Man müesste mit der Notation also sorgfältiger sein, als ich es hier und im Folgenden bin. Mit der ‘trivialen’ Metrik δ_{ij} ist die Unterscheidung der Indexpotation aber irrelevant und wir machen keine Fehler, wenn wir hier etwas ‘schlüdern’ und obere und untere Indizes nicht unterscheiden.

erfüllt. Genaugenommen sind dies natürlich 3 Gleichungen:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} \psi(\bar{x}, t) = p_i \psi(\bar{x}, t), \quad (1.12)$$

für $i = 1, 2, 3$.

Zur Vereinfachung wollen wir uns für den Moment eine eindimensionale Welt vorstellen, in der es nur eine Koordinate x gibt, so dass

$$\psi(x, t) \sim e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad (1.13)$$

und

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = p \psi(x, t). \quad (1.14)$$

Dies ist eine **Eigenwertgleichung** analog zu

$$M_{mn} y_n = \lambda y_m, \quad (1.15)$$

wobei $m, n \in \{1, \dots, N\}$ und \bar{y} ein Eigenvektor der Matrix M (des Operators M) zum Eigenwert λ ist. Allerdings ist unserem Fall der Operator ein Differentialoperator und der Vektorraum ist der Raum von Funktionen ψ . Diese mathematische Struktur werden wir noch viel genauer diskutieren.

Im Moment merken wir uns, dass der Operator $-i\hbar\partial/\partial x$ sehr eng mit dem Impuls p zusammenzuhängen scheint, zumindest für eine ebene Welle (bzw. ein Teilchen in einem Zustand, der einer ebenen Welle entspricht). In 3 Dimensionen hängt $-i\hbar\nabla$ auf ebendiese Weise mit \bar{p} zusammen.

1.3 Schrödingergleichung

Die oben hergeleitete Differentialgleichung ist zwar interessant, aber sie beinhaltet keine Zeitableitungen. Im Gegensatz zu den zentralen Differentialgleichungen der klassischen Mechanik und Feldtheorie, erlaubt sie also keine Vorhersage der Zeitentwicklung.

Allerdings erfüllt die ebene Welle (wir bleiben zunächst in einer Dimension) natürlich noch eine andere, interessantere Differentialgleichung: die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t). \quad (1.16)$$

Wir haben hier schlicht die Dispersionsrelation

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{oder auch} \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad (1.17)$$

durch die passenden Differentialoperatoren ausgedrückt. Dabei haben wir, aufgrund des wellentypischen Faktors $\exp(-i\omega t)$, die Kreisfrequenz ω durch eine Zeitableitung gewonnen.

Wir können dies leicht verallgemeinern, indem wir zulassen, dass unsere Welle/Teilchen auf ihrem Weg durch einen Bereich mit nichtverschwindendem Potential kommt (Abb. 2). Wenn

wir unsere obigen Überlegungen im Bereich mit $V = 0$ voraussetzen, dann wird unser Teilchen im Bereich mit $V > 0$ die kleinere kinetische Energie $E - V$ und damit auch ein entsprechend kleineres p bzw. k haben. Dem in der obigen Differentialgleichung Rechnung zu tragen ist einfach: Wir wollen physikalisch die Ersetzung

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1.18)$$

durchführen. Dadurch wird sichergestellt, dass in Bereichen mit größerem V der Impuls p bzw. die Wellenzahl k kleiner wird. Im Kontext unserer Differentialgleichung entspricht dies der Ersetzung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (1.19)$$

In 3 Dimensionen folgt damit unser zentrales Resultat, die **Schrödingergleichung**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \psi(\bar{x}, t). \quad (1.20)$$

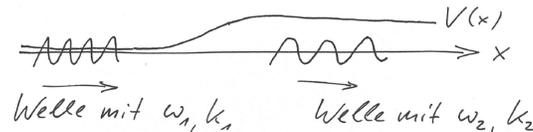


Abbildung 2: Welle in langsam variierendem Potential.

Zusammen mit der Interpretation von $|\psi(\bar{x}, t)|^2$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort \bar{x} zur Zeit t , ist damit eigentlich alles Grundsätzliche gesagt: Der Rest ist mathematische Formalisierung (Hilbertraum etc.), Anwendung (Oszillator, H-Atom und vieles mehr), sowie Verallgemeinerungen (Teilchen mit Spin, mehrere Teilchen etc.). Aber es wäre falsch, das zu unterschätzen: Die völlig neue Struktur der obigen Gleichung (im Vergleich zur klassischen Theorie) birgt sehr viel Interessantes.

Am Rande sei bemerkt, dass unsere Herleitung des $V(x)$ -Terms nicht völlig überzeugend war, weil wir z.B. von ebenen Wellen gesprochen, aber dann verschiedene Wellenzahlen in verschiedenen Raumbereichen zugelassen haben. Man kann das viel besser machen, indem man Wellenpakete in einem langsam veränderlichen Potential untersucht. Dies führt zu einer interessanten Beziehung zwischen dem Fermatschen Prinzip (Licht nimmt immer den extremalen Weg) und dem Wirkungsprinzip der klassischen Mechanik (siehe z.B. [2]). Die Schrödingergleichung folgt so zumindest technisch aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung. Aber wir wollen das hier nicht weiter ausführen. Schlussendlich ist die Schrödingergleichung das grundlegendere Prinzip und die klassische Mechanik folgt in einem gewissen Limes (wie wir später noch genauer verstehen werden).

Zum Abschluss dieses Unterkapitels geben wir noch eine zum tieferen Verständnis sehr nützliche, andere Schreibweise für die Schrödingergleichung an:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \hat{H} \psi(\bar{x}, t), \quad \text{wobei} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad (1.21)$$

und

$$\hat{p} \equiv -i\hbar\nabla. \quad (1.22)$$

Hier haben wir die bereits erwähnte besondere Beziehung zwischen \bar{p} und dem Differentialoperator $-i\hbar\nabla$ formalisiert, in dem wir den zu \bar{p} gehörigen Differentialoperator \hat{p} (eigentlich 3 Differentialoperatoren) definiert haben. Damit haben wir einen Differentialoperator für die kinetische Energie und einen (allerdings ‘nullter Ordnung’) für die potentielle Energie. Die Summe ist ein Differentialoperator für die Energie, der sogenannte Hamilton-Operator \hat{H} . Wir werden den ‘hat’ immer als Notation für Operatoren benutzen.

Wie wir sehen, definiert der Hamilton-Operator die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion. Das ist die Schrödinger-Gleichung.

1.4 Die neue Weltsicht der Quantenmechanik

Wir wollen bereits jetzt ein paar erste zaghafte Schritte zur Formalisierung und konzeptionellen Klärung gehen. Wir erinnern daran, dass ein physikalischer Zustand in der klassischen Hamilton-Mechanik durch einen Punkt im Phasenraum ($2n$ Koordinaten) gegeben war. Die zeitliche Entwicklung folgt einem System von i.A. nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung. Letztere werden durch die Hamilton-Funktion definiert.

Jetzt wird der Zustand durch eine Funktion (die Schrödinger-Wellenfunktion $\psi(x, t)$ mit festem t) auf dem Konfigurationsraum (nicht dem Phasenraum!) beschrieben.³ Die Zeitentwicklung folgt diesmal aus einer linearen (allerdings partiellen) Differentialgleichung. Das entscheidende Objekt, das diese Gleichung definiert, ist der aus der Hamilton-Funktion folgende Hamilton-Operator. Im Moment folgt er einfach durch die Ersetzung $p \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$. Das dem zugrunde liegende tiefere Konzept lernen wir später.

Aufgrund der Linearität der Schrödinger-Gleichung, sind Summen von Lösungen und Produkte mit komplexen Zahlen wieder Lösungen. Es macht also Sinn, die Lineare Struktur des Raumes der Wellenfunktionen zu betonen. Dazu konzentrieren wir uns zunächst auf die Zustände, wir schreiben also

$$\psi(\cdot, t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto \psi(x, t), \quad (1.23)$$

oder vielleicht etwas eleganter

$$\psi_t : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto \psi_t(x) \equiv \psi(x, t). \quad (1.24)$$

Wir betrachten den Vektorraum \mathcal{H} der Funktionen ψ_t :

$$\psi_t \in \mathcal{H}. \quad (1.25)$$

Das ‘ \mathcal{H} ’ steht natürlich für Hilbert-Raum, aber mit der genauen Definition warten wir noch. Im Moment sind es einfach die (‘erlaubten’) Wellenfunktionen (immer bei festem t), die offensichtlich die Vektorraum-Axiome erfüllen. Wir denken uns diese als komplexe Vektoren in einem unendlichdimensionalen Raum. Man kann das sehr konkret machen, indem man sich x diskretisiert vorstellt:

³Wir schreiben alles für $d = 1$, aber die Zahl der Raumdimensionen ist hier beliebig wählbar.

Zum Beispiel betrachte man ein Teilchen, das auf einem Kreis läuft, welcher durch $x \in (0, 2\pi R)$ parametrisiert ist. Dann diskretisiere man, indem man nur die x -Werte $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ betrachtet, mit $x_n = 2\pi Rn/N$. Die Punkte x_0 und x_N sollen identifiziert werden, so dass $\psi(x_0) \equiv \psi(x_N)$. Unsere Wellenfunktion wird nun zu einem endlichdimensionalen komplexen Vektor, $\psi = \{\psi(x_1), \dots, \psi(x_N)\} \in \mathbb{C}^N$. Jetzt können wir Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzen und damit \hat{H} explizit als einen Matrix-Operator auf diesem Raum definieren. Die Zeitentwicklung ist dann nichts anderes als die Bewegung (aufgrund einer linearen Differentialgleichung) eines Vektors. Dies gilt natürlich auch für den technisch komplizierteren Fall des ‘Vektors’ $\psi(x)$ im unendlichdimensionalen Funktionenraum. Konzeptionell bleibt aber alles genau so einfach wie im obigen Fall des \mathbb{C}^N !

Wir gehen nun einen entscheidenden neuen Schritt, indem wir auf \mathcal{H} ein **(komplexes) Skalarprodukt** definieren:

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad (\psi, \chi) \mapsto \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\chi(x) \equiv \langle \psi | \chi \rangle . \quad (1.26)$$

Hier haben wir das Zeitargument zur Vereinfachung unterdrückt. Die sogenannte ‘bra’ (für $\langle \psi |$) und ‘ket’ ((für $| \chi \rangle$) Notation, abgeleitet vom englischen ‘bracket’ \equiv Klammer, ist im Moment nur eine Kurzform für das oben definierte Skalarprodukt.

Wir wollen, ohne uns jetzt schon in zu viel Mathematik zu verstricken, betonen, dass dieses Skalarprodukt die grundlegende lineare Struktur von \mathcal{H} respektiert: Es ist eine Sesquilinearform (eine Verallgemeinerung von Bilinearform) auf \mathcal{H} :

$$\langle \psi | \alpha_1 \chi_1 + \alpha_2 \chi_2 \rangle = \alpha_1 \langle \psi | \chi_1 \rangle + \alpha_2 \langle \psi | \chi_2 \rangle , \quad \alpha_{1,2} \in \mathbb{C} , \quad (1.27)$$

$$\langle \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 | \chi \rangle = \alpha_1^* \langle \psi_1 | \chi \rangle + \alpha_2^* \langle \psi_2 | \chi \rangle . \quad (1.28)$$

Man sagt auch, dass das Skalarprodukt antilinear bzgl. des ersten und linear bzgl. des zweiten Arguments ist. Dies ergibt sich in unserem speziellen Fall natürlich aus der in (1.26) enthaltenen komplexen Konjugation. Allgemeiner gesprochen (mit Blick auf anders definierte Skalarprodukte auf komplexen Vektorräumen) ist die Sesquilinearität notwendig, damit die für jeden Vektor in \mathcal{H} durch

$$\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.29)$$

definierte **Norm** reell sein kann.

Wir warten mit der präzisen Definition von \mathcal{H} bis wir genug Beispiele haben, um die Details zu würdigen. Klar ist jetzt schon, dass wir nicht alle Funktionen sondern nur die **quadratintegriblen** zulassen. Man schreibt auch $\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Physikalisch sind das eben eingeführte Skalarprodukt und die damit definierte Norm von überragender Bedeutung. Sie ermöglichen es uns, die eingangs gemachte Annahme, dass $|\psi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort x charakterisiert, zu formalisieren. Dazu wollen wir zunächst grundsätzlich festlegen, dass physikalische Zustände stets durch (auf Eins) **normierte** Wellenfunktionen dargestellt werden:

$$\psi \in \mathcal{H} \quad \text{mit} \quad \|\psi\| = 1 \quad (\text{bzw.} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1) . \quad (1.30)$$

Falls uns jemand einen nicht normierten Zustand $\psi_1 \in \mathcal{H}$ gibt, so können wir diesen jederzeit durch Multiplikation mit einer passenden Zahl normieren. Explizit ist z.B.

$$\psi(x) = \frac{\psi_1(x)}{\|\psi_1\|} \quad (1.31)$$

automatisch auf Eins normiert, wie man leicht nachrechnen kann.

Nach obigen Vorbemerkungen definieren wir jetzt die zu einem normierten Zustand ψ gehörende **Wahrscheinlichkeitsdichte**

$$\rho(x) \equiv \psi^*(x) \psi(x) \quad (1.32)$$

für die Position des Teilchens auf der x -Achse. Wir stellen fest, dass die Normierungsbedingung $\|\psi\| = 1$ gerade dem zweiten Kolmogorov-Axiom⁴ entspricht:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi(x). \quad (1.33)$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Auffinden des Teilchens im Intervall $[a, b]$,

$$w([a, b]) = \int_a^b dx \rho(x) = \int_a^b dx |\psi(x)|^2, \quad (1.34)$$

ist natürlich stets kleiner oder gleich Eins, wie es sein muss.

Die Bedeutung des Skalarproduktes geht noch viel weiter: Gegeben einen beliebigen Zustand ψ , wollen wir wissen, wie groß die Wahrscheinlichkeit dafür ist, das Teilchen in einem sehr kleinen Intervall $[a, a + \Delta a]$ zu finden. Die Antwort ist natürlich ein Spezialfall der obigen Formel, aber es ist nützlich, sie anders zu schreiben. Dazu definieren wir eine Wellenfunktion χ dadurch, dass

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Delta a}} \quad \text{falls} \quad x \in [a, a + \Delta a], \quad (1.35)$$

und anderenfalls $\chi(x) = 0$. Dieser Zustand beschreibt ein bei a lokalisiertes Teilchen (Abb. 3). Wir berechnen nun

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi^*(x) \psi(x) = \int_a^{a+\Delta a} dx \frac{\psi(x)}{\sqrt{\Delta a}} \simeq \sqrt{\Delta a} \psi(a), \quad (1.36)$$

sowie

$$|\langle \chi | \psi \rangle|^2 \simeq \Delta a |\psi(a)|^2. \quad (1.37)$$

Letzteres entspricht aber gerade der nach (1.34) berechneten Wahrscheinlichkeit, ein durch ψ charakterisiertes Teilchen im Intervall $[a, a + \Delta a]$ zu finden. Damit haben wir eine erste Motivation für die Gültigkeit der sogenannten **Bornschen Regel**:

⁴Nur als sehr grobe Erinnerung an / Vorgriff auf eine detailliertere Diskussion der Wahrscheinlichkeitsrechnung: Seien A Untermengen der Gesamtmenge M (bei uns ist $M = \mathbb{R}$), so sind die Kolmogorov-Axiome

- (1) $w(A) \geq 0$,
- (2) $w(M) = 1$,
- (3) für disjunkte A_i ($i \in I$) gilt: $w(\cup_i A_i) = \sum_i w(A_i)$.

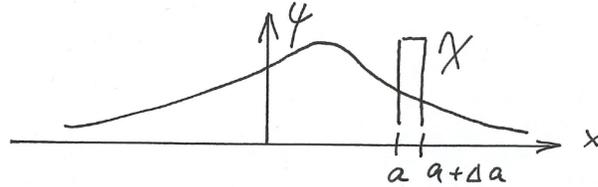


Abbildung 3: Allgemeine (ψ) und eng lokalisierte (χ) Wellenfunktion.

Sei ein physikalisches System in einem Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ gegeben und sei $\chi \in \mathcal{H}$ ein anderer möglicher Zustand. Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand χ zu finden, durch $w = |\langle \chi | \psi \rangle|^2$ gegeben.

Man mache sich klar, was für eine gewaltige Abweichung von der klassischen Intuition bzgl. des Begriffs eines physikalischen Zustandes das mit sich bringt!

Bevor wir dieses sehr grundlegende Unterkapitel abschließen und mehr ins Detail gehen, noch ein paar Worte zur Notation. Die für das Skalarprodukt schon eingeführte **Bra-Ket**-Schreibweise lässt sich noch viel universeller einsetzen: Um Zustände $\psi, \chi \in \mathcal{H}$ zu bezeichnen, werden wir in Zukunft oft

$$|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.38)$$

schreiben. Des Weiteren bezeichnen wir mit

$$\langle \psi |, \langle \chi | \in \mathcal{H}^* \quad (1.39)$$

Elemente des Dualraums, also lineare Funktionale auf \mathcal{H} . Wir meinen damit z.B. für $\langle \psi |$ das lineare Funktional, welches durch die Wirkung von ψ auf χ gemäss (1.26) definiert ist. Die schon benutzte Bra-Ket-Notation

$$\langle \psi | \chi \rangle \equiv \langle \psi | (|\chi\rangle) \quad (1.40)$$

ist damit sehr intuitiv: Sie beschreibt die mathematisch natürliche Art, aus einem Element von \mathcal{H}^* und einem Element von \mathcal{H} durch Anwendung eine komplexe Zahl zu gewinnen.

1.5 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Im letzten Unterkapitel haben wir statt $\psi(x, t)$ nur $\psi(x)$ geschrieben, da wir uns für die Wahrscheinlichkeits-Interpretation der Wellenfunktion zu einem festen Zeitpunkt interessiert haben. Aber natürlich ist auch die der Schrödinger-Gleichung gehorchende Zeitentwicklung von $\psi(x, t)$ und damit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t)$ interessant. Wir wollen in diesem Abschnitt explizit im \mathbb{R}^3 arbeiten: $x \rightarrow \bar{x}$. Es gilt also

$$\rho(\bar{x}, t) = \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t), \quad (1.41)$$

so dass

$$w(V, t) = \int_V d^3x \rho(\bar{x}, t) \quad (1.42)$$

die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, das Teilchen zum Zeitpunkt t im Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$ zu finden.

Wir fragen nun nach der zeitlichen Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\bar{x}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\bar{x}, t) \right) \psi(\bar{x}, t) + \psi^*(\bar{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) \right) = \psi^*(\bar{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) \right) + \text{c.c.} \quad (1.43)$$

Die hier auftretende Zeitableitung von ψ können wir mit der Schrödingergleichung berechnen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \psi(\bar{x}, t), \quad (1.44)$$

so dass folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \left[\frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi^* \psi \right] + \text{c.c.} = \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \text{c.c.} \quad (1.45)$$

Wir haben hier benutzt, dass V reell ist. Des Weiteren können wir umschreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla(\psi^* \nabla \psi) - (\nabla \psi^*)(\nabla \psi) \right] + \text{c.c.} \quad (1.46)$$

Der zweite Term in der Klammer ist aber reell, was zusammen mit dem expliziten imaginären Vorfaktor einen rein imaginären Beitrag ergibt. Dieser fällt nach Addition des komplex konjugierten Terms weg. Wir haben also

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla(\psi^* \nabla \psi) - \nabla(\psi \nabla \psi^*) \right]. \quad (1.47)$$

Dies können wir als Kontinuitätsgleichung (vgl. Hydrodynamik) auffassen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \bar{j} = 0, \quad \text{wobei} \quad \bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right] \quad (1.48)$$

die **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** ist.

Damit ist intuitiv sofort klar, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit, so wie die Gesamtmasse einer strömenden Flüssigkeit, erhalten ist. Formal folgt dies durch Integration der Kontinuitätsgleichung über den gesamten Raum und Anwendung des Gaußschen Satzes. (Wir müssen dabei annehmen, dass ψ im Unendlichen hinreichend schnell abfällt, so dass wir den Oberflächenterm vernachlässigen können.) Natürlich erwarten wir das auch physikalisch, da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen *irgendwo* zu finden, stets Eins belieben muss.

Technisch haben wir bewiesen, dass die Zeitentwicklung des Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gemäß Schrödinger-Gleichung die Norm dieses Vektors (denn genau das war ja die Gesamtwahrscheinlichkeit) nicht verändert.

Es sei noch erwähnt, dass man ρ und \bar{j} im Fall eines geladenen Teilchens als Ladungs und Stromdichte auffassen kann, was den obigen Erhaltungssatz auf ein noch fundamentaleres Niveau hebt. Schließlich ist für die Intuition noch nützlich, den Fall einer ebenen Welle zu betrachten. Es gilt dann $\psi \sim \exp(i\bar{k}\bar{x})$ und somit $\nabla \psi = i\bar{k}\psi$. Daraus folgt

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} 2(-i\bar{k}) \psi^* \psi = \frac{\bar{p}}{m} \rho = \bar{v} \rho, \quad (1.49)$$

wie man auch naiv erwarten würde.

1.6 Erwartungswerte von Observablen

Was schon vielfach erwähnt bzw. angedeutet wurde, soll jetzt noch einmal ganz klar gesagt werden: In der Quantenmechanik ist in vielen Fällen die exakte Voraussage eines Messergebnisses nicht möglich - nur statistische oder Wahrscheinlichkeitsaussagen können gemacht werden. Unser intuitives Standardbeispiel ist der Detektionsort des Teilchens auf dem Schirm des Doppelspalt-experiments. Allgemeiner wollen wir schlicht von dem Ort x eines Teilchens in einer Dimension sprechen. Nehmen wir zur Vereinfachung an, der Ort sei diskret, es gäbe also nur eine gewisse Zahl von Punkten x_i ($i = 1, \dots, N$), an denen das Teilchen sein könnte.

Wir bereiten das Teilchen viele Male exakt gleich vor (z.B. mit dem Durchgang durch den Doppelspalt) und sehen dann nach, wo es ist. Der **Mittelwert** des Ortes bei einer solchen Messreihe ist, wie Sie schon wissen,

$$\bar{x} \equiv \frac{\sum_i n_i x_i}{\sum_i n_i}, \quad (1.50)$$

wobei n_i die Zahl der Versuche ist, bei denen wir den Ort x_i gefunden haben. (Achtung, der Strich in \bar{x} steht hier für Mittelwert, nicht für Vektor.)

Die **Wahrscheinlichkeit** sagt etwas über unsere Erwartung bzgl. des Ergebnisses einer Messreihe aus. Anders formuliert charakterisiert die Wahrscheinlichkeit w_i die relative Häufigkeit des Auftretens des Resultats x_i im Limes sehr vieler Messungen. Der **Erwartungswert** des Ortes x ist dann

$$\langle x \rangle = \sum_i w_i x_i, \quad \text{wobei} \quad \sum_i w_i = 1 \quad (1.51)$$

die Normierung der Wahrscheinlichkeiten beschreibt. Der Mittelwert sehr großer Messreihen wird diesen Erwartungswert immer besser reproduzieren.

Die Quantenmechanik kann uns nicht den einzelnen Versuchs-Ausgang sondern nur die Wahrscheinlichkeiten w_i liefern. In unserem diskreten Spielzeugmodell wäre dies

$$w_i = |\psi_i|^2 \quad (1.52)$$

wobei $|\psi\rangle \equiv \{\psi_1, \dots, \psi_N\}^T \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^N$ die Wellenfunktion ist. Da ihr Argument i (äquivalent zu den Positionen x_i) nur endlich viele Werte annehmen kann, ist dies schlicht ein auf Eins normierter komplexer Vektor:

$$\sum_i \psi_i^* \psi_i = 1. \quad (1.53)$$

Der Erwartungswert des Ortes ist im Spielzeugmodell

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i w_i = \sum_i x_i \psi_i^* \psi_i \quad (1.54)$$

oder, im jetzt offensichtlichen Kontinuumsfalls,

$$\langle x \rangle = \int dx x \rho(x) = \int dx \psi^*(x) x \psi(x). \quad (1.55)$$

In der letzten Formel haben wir x in die Mitte geschrieben, da wir folgende sehr wichtige Interpretation dieser Formel geben wollen:

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle . \quad (1.56)$$

Hierbei ist \hat{x} ein (sehr einfacher) Operator: Er ordnet der komplexen Funktion ψ durch Multiplikation mit der reellen Identitäts-Funktion x (also mit der Funktion f , welche durch $f(x) = x$ definiert ist eine neue komplexe Funktion zu:

$$\hat{x} | \psi \rangle : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto x\psi(x) . \quad (1.57)$$

Der Operator \hat{x} ist ein linearer Operator auf \mathcal{H} :

$$\hat{x} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad | \psi \rangle \mapsto \hat{x} | \psi \rangle . \quad (1.58)$$

Mit unserer Bra-Ket-Notation ist jetzt klar, dass

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx \left(\psi(x) \right)^* \left(x\psi(x) \right) = \int dx \psi^*(x) x \psi(x) \quad (1.59)$$

gilt, wie eingangs behauptet.

Ab sofort werden wir versuchen, die in (1.55) benutzte Schreibweise $\langle x \rangle$ für den Erwartungswert einer physikalischen, reellen Variablen zu vermeiden. Unsere neue Denk- und Sprechweise wird sein:

Der **Observablen ‘Ort’** wird in der Quantenmechanik ein gewisser linearer Operator auf \mathcal{H} zugeordnet. Der Erwartungswert der Ortsmessung ist durch

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x} \rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle \quad (1.60)$$

gegeben. Der erste Ausdruck ist hierbei wiederum ungenau und sollte vermieden werden. Im zweiten Ausdruck wird durch den Index klargemacht, in welchem Zustand der Erwartungswert berechnet werden soll. Der rechts stehende Ausdruck ist schliesslich bereits eine eindeutige Rechenvorschrift. (Dazu müssen wir natürlich wissen, was die Bra-Ket-Notation bedeutet und wie das Skalarprodukt auf \mathcal{H} definiert ist.)

Der Übergang zum \mathbb{R}^3 macht keine Probleme:

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int d^3x \psi^*(\bar{x}) \bar{x} \psi(\bar{x}) . \quad (1.61)$$

Wir müssen uns nur stets im Klaren sein, dass wir es hier mit drei unabhängigen Operatoren (Multiplikation mit x^1 , mit x^2 und mit x^3) und demnach mit drei Gleichungen zu tun haben.

Den Operator zur **Observablen ‘Impuls’** kennen wir schon:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla . \quad (1.62)$$

Wir hoffen jetzt natürlich, dass

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle , \quad (1.63)$$

wenn wir für $|\psi\rangle$ eine ebene Welle mit Wellenvektor \bar{k} nehmen, gerade $\hbar\bar{k}$ sein wird. Aber dies ist leider nicht so einfach, weil eine ebene Welle nicht normierbar ist (das Integral von $\psi^*\psi$ über den ganze Raum divergiert). Die Komplikation ist jedoch gering, da wir auch gut mit einem Wellenpaket arbeiten können:

$$\psi(\bar{x}) = \int d^3k f(\bar{k}) e^{i\bar{k}\bar{x}}. \quad (1.64)$$

Hier sei f eine im Unendlichen schnell abfallende Funktion mit scharfem Maximum bei \bar{k}_0 .

Wir überzeugen uns zunächst, dass ψ normierbar ist:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3x \psi^*(\bar{x})\psi(\bar{x}) \quad (1.65)$$

$$= \int d^3x \int d^3k f^*(\bar{k}) e^{-i\bar{k}\bar{x}} \int d^3q f(\bar{q}) e^{i\bar{q}\bar{x}} \quad (1.66)$$

$$= \int d^3k \int d^3q f^*(\bar{k}) f(\bar{q}) \int d^3x e^{i(\bar{q}-\bar{k})\bar{x}} \quad (1.67)$$

$$= \int d^3k \int d^3q f^*(\bar{k}) f(\bar{q}) (2\pi)^3 \delta^3(\bar{q}-\bar{k}) \quad (1.68)$$

$$= (2\pi)^3 \int d^3k |f(\bar{k})|^2. \quad (1.69)$$

Dies kann, wenn f passend gewählt ist, offensichtlich auf Eins normiert werden. Wir nehmen ab sofort an, dass dies geschehen ist.

Nun wiederholen wir die Rechnung für $\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$. Dies ist aber äußerst einfach, da $-i\hbar\nabla$ bei der Wirkung auf die Exponential-Funktion schlicht einen Faktor $-i\hbar(i\bar{q}) = \hbar\bar{q}$ erzeugt. Nach der δ -Funktions-Integration finden wir also

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = (2\pi)^3 \int d^3k \hbar\bar{k} |f(\bar{k})|^2 \simeq \hbar\bar{k}_0 (2\pi)^3 \int d^3k |f(\bar{k})|^2 = \hbar\bar{k}_0. \quad (1.70)$$

Hier haben wir im zweiten Schritt benutzt, dass $|f(\bar{k})|^2$ nur in der Nähe von \bar{k}_0 signifikant von Null verschieden ist. Das hat uns erlaubt, \bar{k} durch \bar{k}_0 zu ersetzen. Im letzten Schritt haben wir von der angenommenen Normierung Gebrauch gemacht.

Damit haben wir also bestätigt, dass $-i\hbar\nabla$ zur physikalischen Observablen Impuls gehört. Wie am Anfang schon erwähnt, ist damit auch klar, dass

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (1.71)$$

also der Hamilton-Operator, zur Observablen Energie gehört. Die Wirkung von $V(\bar{x})$ ist, wie schon bei x^1 , x^2 und x^3 , schlicht die Multiplikation mit der reellen Funktion $V(\bar{x})$.

2 Das 2-Zustands-System und andere endlich-dimensionale Modelle

Mit dem ersten Kapitel sind wir aus mathematischer Sicht ohne jede Vorbereitung ins kalte Wasser gesprungen: Der von uns als physikalisch interessant erkannte Raum von Funktionen

$\psi(x)$ ist (selbst im eindimensionalen Fall) kompliziert. Das gilt auch für seine verschiedenen Unterräume (z.B. der normierbaren Funktionen). Wir haben dennoch so angefangen, weil unsere Intuition für die klassische Bewegung eines Teilchens in einer Dimension besonders gut entwickelt ist. Demnach ist der fundamentale Schritt von der klassischen Position x und dem Impuls p zur Wellenfunktion $\psi(x)$ (und damit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\psi(x)|^2$) besonders beeindruckend. Aber die Observablen (die Operatoren \hat{x} and $\hat{p} = -i\hbar\nabla$) sowie die durch \hat{H} definierte Dynamik sind sicherlich noch sehr unintuitiv. Bevor wir uns dem weiter zuwenden (und das werden wir in großem Detail tun!), wollen wir ein anderes System einführen. Der Vorteil ist seine enorme Einfachheit, der Nachteil ist, dass es kein klassisches Pendant hat. Wir werden es benutzen, um die Intuition für Hilbert-Räume, Operatoren, die Schrödinger-Gleichung und den Messprozess in der Quantenmechanik zu entwickeln.

2.1 Zwei- und Mehr-Zustands-Systeme

Wir betrachten ein physikalische System, welches nur zwei linear unabhängige⁵ Zustände hat. Ein Art, sich so etwas vorzustellen, ist unser ‘diskretisierter’ eindimensionaler Raum aus Abschnitt 1.6:

$$\psi = \{\psi_1, \psi_2\}^T \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2. \quad (2.1)$$

Ein Vorschlag zur Anschauung wäre vielleicht auch, an ein Teilchen in einer Doppelmulde (Abb. 4) zu denken, wobei wir nur die Information behalten, in welcher der beiden Mulden es ist (nicht, ob es dort ruht, oszilliert etc.).

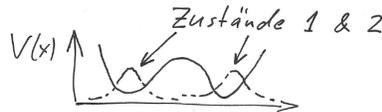


Abbildung 4: Doppelmulde als Modell für ein 2-Zustands-System. Der Hilbert-Raum besteht hier nur aus Linearkombinationen der zwei gestrichelt skizzierten Funktionen.

Das populärste und praktisch interessanteste solche System ist jedoch das eines Teilchens mit Spin. Das Problem ist hier, dass Spin ein relativ kompliziertes Konzept ist und erst spät in unserer Vorlesung überzeugend eingeführt werden kann. Wir wollen den Begriff dennoch hier schon benutzen. Wir machen dabei mathematisch keinen Fehler - es ist nur etwas ad hoc.

Also: Gewisse Teilchen haben einen inneren Freiheitsgrad, der nichttrivial unter räumlichen Drehungen transformiert. Sie kennen schon die zwei Polarisierungen des Photons. Dies ist natürlich für uns nicht optimal, weil es keinen nichtrelativistischen Limes gibt. Die Rotation eines kleinen Balls um eine gewisse Achse ist sehr anschaulich, aber hier nicht perfekt, da der Ball verschieden schnell rotieren und die Drehachse in verschiedene Richtungen zeigen kann. Dieser Fall ist schlicht ‘zu klassisch’. Das eigentlich gute Beispiel ist ein neutrales Teilchen, z.B. Atom (mit Spin 1/2 - aber das können Sie jetzt noch nicht verstehen). Wir wollen die vertikale Achse auszeichnen und nur den Drehimpuls (Spin) entlang dieser Achse betrachten. Der angekündigte ad hoc Fakt ist,

⁵Warum dieser mathematische Begriff hier auftaucht wird sehr bald klar werden.

dass dieses System für Spin-1/2-Teilchen nur zwei linear unabhängige Zustände hat. Wir nennen diese ‘Spin Up’ und ‘Spin Down’, so dass

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.2)$$

der allgemeine Zustand ist. Wir können diesen Raum natürlich mit \mathbb{C}^2 identifizieren:

$$\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \quad \leftrightarrow \quad \{\alpha, \beta\}^T \in \mathbb{C}^2. \quad (2.3)$$

Wir können uns noch mehr dieser sogenannten 2-Zustands-System überlegen, aber sie sind alle äquivalent. Mathematisch liegt das daran, dass alle N -dimensionalen komplexen Vektorräume isomorph sind (für fest gewähltes N). Die im Hamilton-Operator \hat{H} kodierte Dynamik kann natürlich sehr verschieden sein. Im ersten Fall kann dies das ‘Tunneln’ von einer Mulde zur anderen, im zweiten die Beeinflussung des Teilchens durch Magnetfelder etc. sein. (Rufen Sie sich das vermutlich aus der Experimentalphysik bekannte Stern-Gerlach-Experiment ins Gedächtnis, aber sehen sie von den vielen nichttrivialen technischen Details ab.)

Der Übergang zu Mehr-Zustands-Systemen ist offensichtlich: Es gäbe z.B. drei (wie auch immer geartete) linear unabhängige Zustände, $|1\rangle$, $|2\rangle$, und $|3\rangle$. Dann sind die abstrakte und die \mathbb{C}^3 -Beschreibung des allgemeinen Zustands

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle + \gamma|3\rangle \quad \leftrightarrow \quad \{\alpha, \beta, \gamma\}^T \in \mathbb{C}^3. \quad (2.4)$$

Schließlich sei noch angemerkt, dass mit einer für viele Zwecke ausreichenden Präzision das kompliziertere System eines Teilchens im Ortsraum in unserem Satz von Modellen enthalten ist: Man denke sich den Ortsraum einfach sehr groß aber endlich (z.B. mit hohen Potentialbarrieren am Rand oder $x \in S^1$) und sehr fein diskretisiert. Dann ist zwar obiges N sehr groß, aber es bleibt prinzipiell bei dem Zustandsraum \mathbb{C}^N .

2.2 Endlichdimensionale komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt

Man könnte auch endlichdimensionale Hilberträume sagen, aber ich wollte zumindest in der Überschrift vorsichtig sein, weil manche Autoren mit Hilbertraum immer etwas unendlichdimensionales (z.B. einen Funktionen-Raum) meinen. Im Folgenden werde ich den Begriff Hilbertraum aber, wie in der Physik üblich, auch im endlichdimensionalen Fall benutzen.

Ziel dieses Kapitels soll es sein, einige (meist schon gut bekannte) Begriffe und Fakten zusammenzustellen.

Der erste Begriff ist der des **Vektorraums** \mathbb{V} . Der relevante Körper ist für uns in der Quantenmechanik immer \mathbb{C} . Die Axiome werde ich nicht wiederholen - bitte schlagen Sie diese nach. Was eine **Basis** ist, sollte auch bekannt sein. Der Vektorraum heißt **endlichdimensional**, wenn es eine endliche Basis gibt. Die Zahl der Basis-Elemente heißt Dimension von \mathbb{V} . Dies macht natürlich nur Sinn, weil jede Basis die gleiche Zahl von Elementen hat. Jedes \mathbb{V} der Dimension N ist zu \mathbb{C}^N isomorph. Wie man dies mittels Zerlegung in die Basis zeigt, wurde oben schon gesagt.

Die quantenmechanische Interpretation erfordert ein positiv definites Skalarprodukt. Wenn dieses vorliegt, wollen wir von \mathcal{H} (für Hilbertraum) schreiben. Das Skalarprodukt ist eine Abbildung

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \{\psi, \chi\} \mapsto \langle \psi | \chi \rangle, \quad (2.5)$$

welche im ersten Argument antilinear und im zweiten linear (siehe oben) und **hermitesch** ist:

$$\langle \psi | \chi \rangle^* = \langle \chi | \psi \rangle. \quad (2.6)$$

Letzteres impliziert, dass $\langle \psi | \psi \rangle$ reell ist. Positiv definit heißt, dass

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad \text{und} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = \mathbf{0}. \quad (2.7)$$

Wir erinnern daran, dass die Null in einem Vektorraum eindeutig ist.

Dies sind genau die Eigenschaften, die wir in der Quantenmechanik brauchen werden, so dass wir jetzt definieren: **Ein endlichdimensionaler Hilbertraum⁶ ist ein Vektorraum über \mathbb{C} mit positiv definitem Skalarprodukt.**

Es gibt in solchen Räumen Orthonormalbasen. (Mittels Gram-Schmidt-Verfahren kann man aus einer gegebenen Basis eine Orthonormalbasis konstruieren.) Eine solche Basis erfüllt

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.8)$$

Man prüft leicht nach, dass für eine orthonormale Basis und mit

$$|\psi\rangle = \psi^i |e_i\rangle \quad \text{etc.} \quad (2.9)$$

das Skalarprodukt ausgedrückt durch die Komponenten dem kanonischen Skalarprodukt auf \mathbb{C}^N entspricht:

$$\langle \psi | \chi \rangle = \psi^{*i} \chi^j \delta_{ij} = \bar{\psi}^* \cdot \bar{\chi}. \quad (2.10)$$

Wie schon erwähnt, ist es bequem, auch die Notation

$$\langle \psi | \in \mathcal{H}^* \quad (2.11)$$

zu benutzen. Der Dualraum \mathcal{H}^* ist der Raum der Linearen Funktionale auf \mathcal{H} . Das Objekt $\langle \psi |$ definiert eine solche Abbildung durch

$$\langle \psi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\chi\rangle \mapsto \langle \psi | \chi \rangle. \quad (2.12)$$

Es ist also per Definition Element des Dualraums. Wie auch im Reellen ist es bequem, den Dualraum im Fall von \mathbb{C}^N (mit kanonischem Skalarprodukt) mit den Zeilenvektoren zu identifizieren.

Wir sollten vielleicht noch folgendes bemerken: Es gibt zwar zu jedem endlichdimensionalen Vektorraum einen Dualraum von gleicher Dimension, aber es gibt im Allgemeinen keine *kanonische* Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$. Wenn es allerdings ein Skalarprodukt gibt, dann gibt es auch eine solche kanonische Abbildung: $|\psi\rangle \mapsto \langle \psi |$.

⁶Wie schon erwähnt, manche Autoren reservieren den Begriff Hilbertraum ausschließlich für unendlichdimensionale Räume. In der Physik ist unsere Definition und Sprechweise aber sehr verbreitet.

Ein nützlicher Fakt ist die **Schwarzsche Ungleichung**:

$$|\langle \psi | \chi \rangle| \leq \|\psi\| \|\chi\|. \quad (2.13)$$

Sie besagt etwas, was für reelle Vektoren anschaulich völlig klar ist: Der Betrag des Skalarproduktes ist kleiner oder gleich dem Produkt der Beträge der Vektoren. Der allgemeine Beweis beruht auf einer sehr einfachen Idee, aufbauend auf der Erfahrung mit reellen Vektoren: Die Ungleichung gilt, weil die Vektoren i.A. nicht parallel sind. Ein Maß dafür ist, dass z.B. die Projektion von $|\psi\rangle$ auf die $|\chi\rangle$ -Richtung nicht mit $|\psi\rangle$ übereinstimmt. Also schreiben wir die Differenz zwischen $|\psi\rangle$ und dieser Projektion hin,

$$|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle \langle \chi | \psi \rangle}{\|\chi\| \|\chi\|}, \quad (2.14)$$

und analysieren die (natürlich korrekte!) Aussage, dass ihr Betragsquadrat nicht negativ ist:

$$\left(\langle \psi | - \frac{\langle \psi | \chi \rangle \langle \chi |}{\langle \chi | \chi \rangle} \right) \left(|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle \langle \chi | \psi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} \right) \geq 0. \quad (2.15)$$

Daraus folgt durch Ausmultiplizieren

$$\langle \psi | \psi \rangle - \frac{\langle \chi | \psi \rangle \langle \psi | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} \geq 0, \quad (2.16)$$

und daraus durch Umstellen und Wurzelziehen die Schwarzsche Ungleichung.

Ein weiterer nützlicher Fakt ist die **Dreiecksungleichung**:

$$\|\psi + \chi\| \leq \|\psi\| + \|\chi\|, \quad (2.17)$$

was wiederum völlig der reellen Anschauung entspricht. Der Beweis besteht im Ausmultiplizieren von

$$\|\psi + \chi\|^2 = \langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle, \quad (2.18)$$

dem Benutzen von

$$\langle \psi | \chi \rangle + \langle \chi | \psi \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle \psi | \chi \rangle \leq 2 |\langle \psi | \chi \rangle|, \quad (2.19)$$

und der Anwendung der Schwarzschen Ungleichung. Die Durchführung überlassen wir den Übungen.

Bitte beachten Sie, dass obige Beweise die endliche Dimension von \mathcal{H} nicht benutzt haben - die Ungleichungen gelten also auch in 'echten' Hilbert-Räumen.

Schließlich wollen wir noch an den Begriff des linearen Operators auf einem Vektorraum erinnern: Ein Operator ist eine lineare Abbildung

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle. \quad (2.20)$$

Wichtig ist, dass die Menge solcher Operatoren selbst ein Vektorraum ist (weil man Operatoren addieren und mit Zahlen multiplizieren kann). Darüberhinaus ist sie sogar eine **Algebra**,

weil man Operatoren auch Multiplizieren kann und dabei wieder einen Operator bekommt. Die Multiplikation ist durch Hintereinanderausführung definiert:

$$(AB) : |\psi\rangle \mapsto A(B|\psi\rangle). \quad (2.21)$$

Es ist klar, dass die Multiplikation bzgl. der beiden Argumente linear ist, wie es nach Definition einer Algebra auch sein muss.

Operatoren können im endlichdimensionalen Fall mit Matrizen identifiziert werden. Dies ist klar, weil endlichdimensionale Vektorräume mit \mathbb{C}^N identifiziert werden können, und lineare Operatoren auf \mathbb{C}^N Matrizen sind.

2.3 Erste Schritte zur Physik des Zwei-Zustands-Systems

Bevor wir den Formalismus weiterentwickeln, wollen wir erste physikalische Anwendungen besprechen. Wir werden dabei vom Spin-Up/Spin-Down System sprechen, aber jeder darf sich ein Zwei-Zustands-System seiner Wahl vorstellen - sie sind mathematisch alle gleich.

Wir erinnern an unsere Erfahrung mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ des Teilchens. Wenn x diskret wird, haben wir keine Wahrscheinlichkeitsdichte sondern einen diskreten Satz von Wahrscheinlichkeiten $|\psi_i|^2$. Im Fall von $N = 2$ ist

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle, \quad w_\uparrow = |\alpha|^2, \quad w_\downarrow = |\beta|^2, \quad (2.22)$$

wobei wir die Basis als orthonormal definieren wollen ($\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$ und $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$). Die Bedingung, dass sich die Wahrscheinlichkeiten zu Eins addieren, entspricht gerade der Normierung von $|\psi\rangle$.

Die naheliegende Messgröße oder Observable ist natürlich der Spin. Sagen wir, wir messen $+1/2$ falls der Zustand $|\uparrow\rangle$ vorliegt und $-1/2$ bei $|\downarrow\rangle$. Welchen Operator S könnten wir wählen, so dass $\langle\psi|S|\psi\rangle$, wie im Wellenfunktions-Fall, den richtigen Erwartungswert reproduziert? Die Wahl ist sehr naheliegend: Wir benutzen die Komponenten-Schreibweise

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

und definieren

$$S = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Man rechnet sofort nach, dass

$$\langle\psi|S|\psi\rangle = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 = \frac{1}{2}w_\uparrow - \frac{1}{2}w_\downarrow \quad (2.25)$$

ist. Der letzte Ausdruck beschreibt, wie gefordert, den Erwartungswert einer Spin-Messung bei der mit der Wahrscheinlichkeit w_\uparrow der Wert $1/2$ und mit der Wahrscheinlichkeit w_\downarrow der Wert $-1/2$ gefunden wird. Also ist S der zum Spin gehörige Operator und wir haben ein weiteres, sehr einfaches Beispiel für die **wichtige Grundregel**, dass der Operator ‘zwischen Bra und Ket eines Zustands $|\psi\rangle$ den Erwartungswert der Messung in diesem Zustand liefert’.

Wichtig ist auch, wie der Zustand nach der Messung aussieht. Im ursprünglichen Beispiel eines Teilchens ist uns klar, dass das Teilchen unmittelbar nach der Detektion an dem Ort ist, wo es detektiert wurde (z.B. in dem Szintillator, der einen Lichtblitz abgestrahlt hat). Aus der Wellenfunktion $\psi(x)$ ist also (wenn wir vom Normierungsproblem absehen) so etwas wie $\delta(x-x_0)$ geworden, wobei x_0 den Ort des betreffenden Szintillators bezeichnet.

Hier heißt dies, dass nach der Spin-Messung im Fall des Ergebnisses $+1/2$ anschließend **mit Sicherheit** der Zustand $|\uparrow\rangle$ vorliegt, im Fall von $-1/2$ **mit Sicherheit** $|\downarrow\rangle$. Wir lernen also: **In der Quantenmechanik beeinflusst der Messprozess zwingenderweise das System.** Genauer gesagt, die Messung entspricht einer **Projektion auf den zum Messwert gehörenden Eigenvektor des relevanten Operators.**

Letzteres Bedarf der Erläuterung: Ein Operator A hat einen Eigenvektor $|a\rangle$ zum Eigenwert a falls

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (2.26)$$

gilt. Demnach hat also S zwei Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\pm 1/2$:

$$S|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \quad S|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle. \quad (2.27)$$

Vor der Messung haben wir $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$, nach der Messung entweder $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$.

Dies wird noch klarer, wenn wir den Begriff des Projektionsoperators oder Projektors einführen: Ein Operator P heißt Projektor, falls $P^2 = P$ gilt. Ein einfaches Beispiel ist der auf reelle 3-Vektoren wirkende Operator

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

welcher offensichtlich auf die x - y -Ebene projiziert. Die Bedingung $P^2 = P$ sagt aus, dass nochmaliges Projizieren nichts mehr ändert: Der Vektor ist schon in der x - y -Ebene und bleibt dann unverändert.

Wir können nun S als Linearkombination der Projektoren auf den Up- und den Down-Zustand schreiben:

$$S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}P_{\uparrow} - \frac{1}{2}P_{\downarrow}. \quad (2.29)$$

So eine Zerlegung gibt es für jede Observable (ggf. natürlich mit mehr Projektoren - einer für jedes mögliche Messergebnis bzw. jeden Eigenwert. Eine Messung mit Resultat $\pm 1/2$ beeinflusst $|\psi\rangle$ so, wie die Wirkung von P_{\uparrow} bzw. P_{\downarrow} . Dabei ist natürlich zu beachten, dass man anschließend neu normieren muss, weil sich durch das Nullsetzen z.B. des Down-Anteils die Norm verändert hat. Also, die **Messung mit Ausgang $+1/2$ wirkt wie:**

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \quad \longrightarrow \quad \alpha|\uparrow\rangle \quad \longrightarrow \quad |\uparrow\rangle. \quad (2.30)$$

Eigentlich gibt es dabei physikalisch keine Trennung zwischen der Projektion im ersten und der Normierung im zweiten Schritt. Also hat man schlicht:

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \quad \longrightarrow \quad |\uparrow\rangle. \quad (2.31)$$

Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom **Kollaps der Wellenfunktion** (auf die Komponente, die dem Messergebnis entspricht). Es ist hierin, im Gegensatz zu dem, was gelegentlich gesagt wird, nichts mysteriöses: Der Messprozess beinhaltet selbst eine oft sehr nichttriviale Dynamik, von der man abstrahiert, und stattdessen mit den sehr viel einfacheren Projektionsoperatoren arbeitet. Das Neu-Normieren wird erforderlich, weil wir durch Kenntnis des Messergebnisses den Anteil $|\beta|^2$ der Gesamtwahrscheinlichkeit eliminiert haben. Was übrigbleibt, muss jetzt wieder auf Wahrscheinlichkeit Eins normiert werden.⁷

Erwähnenswert ist noch eine sehr naheliegende andere Schreibweise für Projektoren auf einen bestimmten, auf Eins normierten Vektor:

$$P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.32)$$

Machen wir uns zunächst klar, wie P_ψ als Operator aufzufassen ist:

$$P_\psi : |\chi\rangle \mapsto |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle. \quad (2.33)$$

Prüfen wir, dass P_ψ ein Projektor ist:

$$P_\psi^2|\chi\rangle = P_\psi(|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle) = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = P_\psi|\chi\rangle. \quad (2.34)$$

Diese Vorarbeiten erlauben uns eine sehr schöne und intuitive Darstellung für eine Observable im Fall, dass ihre Eigenvektoren und Eigenwerte bekannt sind:

$$S = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|. \quad (2.35)$$

Benutzen Sie diese Schreibweise, um $\langle\psi|S|\psi\rangle$ zu berechnen - das ist ausgesprochen bequem!

Betrachten wir nun gleich noch eine weitere Observable, den Energie- oder Hamilton-Operator. Wir haben bisher die Dynamik unseres Systems noch nicht spezifiziert - wir haben alle Freiheit und wollen diese jetzt nutzen: Wir **wählen** den Hamilton-Operator

$$H = \begin{pmatrix} E_\uparrow & 0 \\ 0 & E_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Mit anderen Worten, wir legen fest, dass der Spin-Up- und dem Spin-Down-Zustand jeweils gewisse, feste Energien haben, die verschieden sein können. (Technisch realisiert man das z.B. durch ein passendes Magnetfeld.) Es sollte klar sein, dass man H mit den gleichen Projektionsoperatoren schreiben kann wie S . Nur die zugehörigen Eigenwerte sind andere.

Wir können nun die Schrödinger-Gleichung,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle, \quad (2.37)$$

sofort lösen, indem wir den völlig allgemeinen Ansatz

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|\uparrow\rangle + \beta(t)|\downarrow\rangle \quad (2.38)$$

⁷Wer zurecht trotzdem etwas unzufrieden ist, weil er gerne in ein und derselben Analyse sehen würde, was mit dem $|\downarrow\rangle$ -Anteil der Wellenfunktion passiert, der muss sich gedulden. Wir kommen dazu, wenn wir später genauer über Messprozess, Dekohärenz, sowie über die verschiedenen sogenannten 'Interpretationen' der QM sprechen.

machen. (Wir haben in der Schrödinger-Gleichung keine partielle Ableitung geschrieben, da hier t die einzige Variable ist. Ebenso verzichten wir auf das ‘hat’-Symbol, wenn es außer Frage steht, dass H ein Operator ist.)

Es folgt

$$i\hbar(\dot{\alpha}|\uparrow\rangle + \dot{\beta}|\downarrow\rangle) = E_{\uparrow}\alpha|\uparrow\rangle + E_{\downarrow}\beta|\downarrow\rangle. \quad (2.39)$$

bzw. wegen der linearen Unabhängigkeit der beiden Basis-Vektoren

$$i\hbar\dot{\alpha} = E_{\uparrow}\alpha \quad \text{und} \quad i\hbar\dot{\beta} = E_{\downarrow}\beta. \quad (2.40)$$

Die Lösungen sind natürlich Exponential-Funktionen, die Exponenten liest man ohne Mühe ab. Wir fassen gleich beide Lösungen zusammen:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(0)e^{-iE_{\uparrow}t/\hbar}|\uparrow\rangle + \beta(0)e^{-iE_{\downarrow}t/\hbar}|\downarrow\rangle. \quad (2.41)$$

Dabei erkennen wir unser grundlegendes Postulat $E = \hbar\omega$ bzw. $\omega = E/\hbar$ wieder. Wir sehen, dass jeder der beiden Energie-Eigenzustände nur seine Phase verändert. Die Phase rotiert um so schneller, je größer die Energie ist. Mehr passiert nicht - insbesondere bleiben die durch $|\alpha|^2$ und $|\beta|^2$ gegebenen Wahrscheinlichkeiten für jeden der beiden Anteile gleich. Noch eindringlicher: Wenn man mit einem bestimmten Energie-Eigenzustand (z.B. $|\uparrow\rangle$) startet, dann bleibt dieser in der Zeitentwicklung erhalten. Nur seine Phase rotiert.

Die Übertragung auf einen N -dimensionalen Hilbert-Raum ist offensichtlich, so lange wir eine Basis $\{|i\rangle\}$ von Eigenvektoren von H kennen:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(0) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle, \quad \text{wobei} \quad H|i\rangle = E_i|i\rangle. \quad (2.42)$$

Die Quantendynamik ist in diesem Sinne von erstaunlicher Einfachheit - nur die Phasen der Energie-Eigenvektoren drehen sich. Die Schwierigkeit wird darin bestehen, eine solche Basis zu finden und einen gegebenen Anfangs-Vektor in diese zu zerlegen.

2.4 Adjungierte und Hermitesche Operatoren

Es ist jetzt Zeit, wieder einiges von dem Gelernten zu formalisieren. In diesem Abschnitt ist wichtig, dass \mathcal{H} **endlichdimensional** ist. Sonst wären zentrale Aspekte von dem, was jetzt folgt, wesentlich komplizierter.

Betrachten wir einen linearen Operator $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, wobei \mathcal{H} ein Hilbertraum ist. Wir definieren den zu A **adjungierten Operator** A^\dagger durch

$$\langle A^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\psi|A\chi\rangle, \quad (2.43)$$

für beliebige $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$. Hier benutzen wir die Bra-Ket-Notation nur zur Darstellung des Skalarproduktes. Wir meinen also links das Produkt von $A^\dagger|\psi\rangle$ mit $|\chi\rangle$ und rechts das Produkt von $|\psi\rangle$ mit $A|\chi\rangle$.

Nochmal in Worten: Zu jedem A gibt es eine Operator A^\dagger , so dass die Wirkung von A auf den rechten Vektor im Skalarprodukt ersetzt werden kann durch die Wirkung von A^\dagger auf den linken Vektor im Skalarprodukt.

Überzeugen wir uns zunächst, dass (2.43) tatsächlich einen Operator A^\dagger auf \mathcal{H} definiert: Die rechte Seite (2.43) definiert offensichtlich ein lineares Funktional auf Vektoren $|\chi\rangle$. Also definiert sie ein Element von \mathcal{H}^* . Da nun aber \mathcal{H}^* zu \mathcal{H} auf eine kanonische Weise isomorph ist, definiert sie einen Vektor $A^\dagger|\psi\rangle$.

Eine äquivalente Art, den adjungierten Operator zu definieren, ist die folgende: Wir definieren zunächst eine Wirkung von beliebigen Operatoren auf Bra-Vektoren von rechts:

$$A : \mathcal{H}^* \rightarrow \mathcal{H}^* , \quad \langle\psi| \mapsto \langle\psi|A . \quad (2.44)$$

Dabei ist $\langle\psi|A \in \mathcal{H}^*$ durch

$$\langle\psi|A : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} , \quad |\chi\rangle \mapsto \langle\psi|A\chi \quad (2.45)$$

definiert. Dies ermöglicht uns, Skalarprodukte mit Operatoren beliebig zu klammern:

$$\langle\psi|A|\chi\rangle \equiv \langle\psi|(A|\chi\rangle) \equiv (\langle\psi|A)|\chi\rangle . \quad (2.46)$$

Wir definieren nun A^\dagger als den Operator, welcher folgende Aussage wahr macht:

$$A|\psi\rangle = |\chi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle\psi|A^\dagger = \langle\chi| . \quad (2.47)$$

In Worten: Die Wirkung mit A von links auf \mathcal{H} entspricht der Wirkung mit A^\dagger von rechts auf \mathcal{H}^* (gegeben unseren kanonischen Isomorphismus).

Jetzt übersetzen wir das ganze in Matrix-Sprache, wobei wir eine Orthonormalbasis $|e_i\rangle \equiv |i\rangle$ benutzen. Dazu erinnern wir zunächst daran, wie man einen Vektor $|\psi\rangle$ in diese Basis zerlegt:

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle . \quad (2.48)$$

Wir behaupten, dass man die so definierten Komponenten gemäß

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle \quad (2.49)$$

berechnen kann. Dazu müssen wir z.B. nachrechnen, dass (2.48) aus (2.49) folgt. Dazu wiederum genügt es, (2.48) für die Projektion auf jedes Element der dualen Basis zu prüfen:

$$\text{Links: } \langle j|\psi\rangle \quad \text{Rechts: } \langle j| \sum_i \psi_i |i\rangle = \sum_i \psi_i \delta_{ij} = \psi_j = \langle j|\psi\rangle , \quad (2.50)$$

was zu beweisen war.

Damit entspricht jeder Operator A der Matrix

$$A_{ij} = \langle i|A|j\rangle . \quad (2.51)$$

Um das zu zeigen, bestimmen wir die Komponenten von $A|\psi\rangle$:

$$\langle i|A|\psi\rangle = \langle i|A \sum_j |j\rangle \psi_j = \sum_j A_{ij} \psi_j . \quad (2.52)$$

Der letzte Ausdruck beschreibt nun aber gerade die Matrixmultiplikation von A_{ij} mit dem Spaltenvektor $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}^T$.

Jetzt werten wir (2.43) für Basiselemente, $|\psi\rangle = |i\rangle$ und $|\chi\rangle = |j\rangle$, aus. Wegen der Hermitizität des Skalarproduktes steht links

$$(\langle\chi|A^\dagger|\psi\rangle)^* = (A^\dagger)_{ji}^*. \quad (2.53)$$

Die rechte Seite ist einfach

$$\langle i|A|j\rangle = A_{ij}. \quad (2.54)$$

Wir sehen, dass die Matrizen zu A und A^\dagger durch vertauschen der Indizes und komplexe Konjugation ineinander übergehen, also

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*. \quad (2.55)$$

Wenn wir gleichzeitig mit Matrizen und Operatoren arbeiten wollen, dann ist es bequem, die Operatoren mit einem ‘Hut’ zu versehen und die zugehörige Matrix durch das gleiche Symbol ohne Hut zu bezeichnen.

Es gilt dann: Wenn \hat{A}^\dagger der zu \hat{A} **adjungierte Operator** ist, so erfüllen die zugehörigen Matrizen

$$A^\dagger = (A^T)^* = (A^*)^T. \quad (2.56)$$

Man sagt auch, dass A^\dagger die zu A **adjungierte** (oder **hermitesch konjugierte** oder auch **hermitesch transponierte** Matrix ist. Wir werden in Zukunft das Symbol † sowohl für den abstrakten adjungierten Operator als auch für die adjungierte Matrix benutzen. Die Äquivalenz des Adjungierens zum Adjungieren von Matrizen impliziert natürlich sofort $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.

Auch (2.47) impliziert, dass die Matrix zum adjungierten Operator schlicht die hermitesch transponierte Matrix ist. Prüfen Sie dies selbst nach, indem Sie wie oben eine Orthonormalbasis benutzen.

Ein Operator A auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum heißt **hermitesch**, wenn

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (2.57)$$

gilt. Er entspricht damit einer **hermiteschen Matrix**, also einer Matrix, welche

$$(A^*)^T = A \quad (2.58)$$

erfüllt. Solche Operatoren werden für uns im Folgenden eine zentrale Rolle spielen, weil für **hermitesche Operatoren** stets **reelle Erwartungswerte** haben. Unsere **Observablen** werden also stets aus dieser Operatorklasse kommen.

Bevor wir die Realität der Erwartungswerte beweisen, wollen wir einen anderen sehr nützlichen Fakt feststellen:

$$\langle\chi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\chi\rangle. \quad (2.59)$$

Dies folgt unmittelbar aus der Definition (2.43) indem wir zunächst links die Hermitizität des Skalarprodukts benutzen,

$$\langle\chi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\chi\rangle, \quad (2.60)$$

anschließend komplex konjugieren und schließlich noch die Namen ψ und χ tauschen.

Wenn nun A hermitesch und $|\psi\rangle = |\chi\rangle$ ist, so folgt

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\psi\rangle. \quad (2.61)$$

Dies ist aber gerade die Behauptung, dass hermitesche Operatoren reelle Erwartungswerte (und damit natürlich auch reelle Eigenwerte) haben.

Die obige Rechnung wird besonders anschaulich, wenn man mit Matrizen arbeitet. Dazu seien jetzt ψ und χ (ohne Bra bzw. Ket) Spalten-Vektoren. Außerdem wollen wir stets (für beliebige $(n \times m)$ Matrizen) die notation $M^{*T} \equiv M^\dagger$ benutzen. Es gilt dann

$$\langle\psi|A|\chi\rangle^* = (\psi^\dagger A\chi)^* = (\psi^\dagger A\chi)^\dagger = \chi^\dagger A^\dagger \psi = \langle\chi|A^\dagger|\psi\rangle, \quad (2.62)$$

wie eben schon abstrakt gezeigt.

2.5 Eigenwerte, Diagonalisierbarkeit, unitäre Operatoren

Wir waren im letzten Abschnitt sehr ausführlich, obwohl ein Großteil des gesagten natürlich schon aus der Linearen Algebra bzw. Theorie I/II bekannt sein sollte. Wichtig war für uns die Gewöhnung an die Bra-Ket-Schreibweise. Wenn man den Übergang zwischen dieser abstrakten Notation und gewöhnlichen komplexen Matrizen bzw. Vektoren einmal gewohnt ist, kann man sich mehr und mehr schlicht auf elementare Algebra berufen. Das wollen wir im Folgenden auch tun.

Wir erinnern uns: $|\psi\rangle$ heißt Eigenvektor zu \hat{A} zum Eigenwert λ , falls

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad \text{bzw.} \quad A_{ij}\psi_j = \lambda\psi_i \quad (2.63)$$

gilt.⁸ Beliebige Operatoren können Eigenwerte und Eigenvektoren haben. Einen Eigenvektor findet man immer, wie gleich klar werden wird. Für uns entscheidend ist, dass **hermitesche Operatoren stets eine Basis aus Eigenvektoren haben, in der sie demnach als Matrix diagonal sind. Der Übergang zu dieser Basis wird durch eine unitäre Transformation bzw. unitäre Matrix realisiert.**

Die Herleitung obiger Aussage war Gegenstand des Kapitels 3.3 der Theorie II (und ist vermutlich noch besser aus der linearen Algebra bekannt). Wir erinnern deshalb nur kurz an die Beweisidee. Sei \hat{H} unser hermitescher Operator und H die entsprechende Matrix. Die Gleichung

$$\det(H - \lambda\mathbb{1}) = 0, \quad (2.64)$$

deren linke Seite man auch als charakteristisches Polynom (in der Variablen λ) bezeichnet, hat stets eine Lösung λ_1 . Die Gleichung

$$(H - \lambda_1\mathbb{1})x = 0 \quad (2.65)$$

hat demnach stets einen Lösungs-Vektor x_1 , der dann ein Eigenvektor zu λ_1 ist. Unter Ausnutzung der Hermitezität von H zeigt man, dass das orthogonale Komplement von x_1 durch H auf

⁸Wir haben den Eigenwert hier nicht, wie sonst üblich, mit ψ bezeichnet, weil wir dieses Symbol auch schon für den \mathbb{C}^N -Vektor und dessen Elemente verwenden.

sich selbst abgebildet wird. H ist auf diesem Unterraum wieder hermitesch und wir können unser Argument wiederholen. Dann finden wir noch einen Eigenwert, Eigenvektor, usw. usf. Am Ende haben wir eine Basis von Eigenvektoren zu Eigenwerten λ_i , die wir normieren und mit

$$\{ |\lambda_i\rangle \} \quad (2.66)$$

bezeichnen wollen.

Die obige Herleitung liefert automatisch auch, dass die Eigenvektoren alle orthogonal sind. Trotzdem ist es sinnvoll, auch unabhängig davon beweisen zu können, **dass Eigenvektoren hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten stets orthogonal sind**. Man sieht dies, weil

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \lambda_1 | H | \lambda_2 \rangle - \langle \lambda_1 | H | \lambda_2 \rangle = \langle \lambda_1 | H^\dagger | \lambda_2 \rangle - \langle \lambda_1 | H | \lambda_2 \rangle = (\langle \lambda_2 | H | \lambda_1 \rangle)^* - \langle \lambda_1 | H | \lambda_2 \rangle \\ &= (\langle \lambda_2 | \lambda_1 \rangle \lambda_1)^* - \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle \lambda_2 = \lambda_1^* \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle - \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle \lambda_2 = (\lambda_1 - \lambda_2) \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle, \end{aligned} \quad (2.67)$$

so dass für $\lambda_1 - \lambda_2 \neq 0$ die Orthogonalität folgt.

Wir wollen nun noch über den Basiswechsel zwischen ursprünglicher Basis und Eigenvektorbasis sprechen. Dazu zerlegen wir letztere in unsere ursprüngliche Basis:

$$|\lambda_i\rangle = |j\rangle U_{ji}. \quad (2.68)$$

Es gilt

$$\delta_{ij} = \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = U_{ki}^* \langle k | l \rangle U_{lj} = U_{ki}^* U_{kj} = U_{ik}^\dagger U_{kj} = (U^\dagger U)_{ij}. \quad (2.69)$$

Dies definiert aber gerade eine **unitäre Matrix**: U ist unitär, falls

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (2.70)$$

Wir benutzen die gleiche Definition für einen **unitären Operator**:

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (2.71)$$

Wir haben gesehen, dass man eine unitären Matrix zum Wechsel zwischen Orthonormalbasen benutzen kann.

Die entscheidende Eigenschaft unitärer Operatoren ist ihre Kompatibilität mit dem Skalarprodukt:

$$\langle \hat{U}\psi | \hat{U}\chi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle. \quad (2.72)$$

Als Spezialfall gilt insbesondere: Die Anwendung eines unitären Operators läßt die Norm von Vektoren unverändert.

Wir wollen den obigen Basis-Wechsel auch noch in abstrakter Operator-Sprache formulieren. Dazu berechnen wir gemäß (2.68) die k -te Komponente von $|\lambda_i\rangle$:

$$(|\lambda_i\rangle)_k = \langle k | \lambda_i \rangle = U_{ki} = U_{kl} \delta_{li} = U_{kl} (|i\rangle)_l. \quad (2.73)$$

In Operator-Sprache impliziert dies

$$|\lambda_i\rangle = \hat{U} |i\rangle, \quad (2.74)$$

so dass wir sagen können, der Operator \hat{U} überführt unsere Ausgangs-Basis in die Eigenwert-Basis. Die Elemente von H in dieser neuen Basis sind

$$\langle \lambda_i | \hat{H} | \lambda_i \rangle = \lambda_j \delta_{ij}, \quad (2.75)$$

H ist also diagonal. Umgekehrt gilt natürlich auch: Jeder Operator, der in irgendeiner Orthonormal-Basis diagonal mit reellen Eigenwerten ist, ist hermitesch.

Diese besondere Beziehung zwischen Hermitizität und Realität der Eigenwerte (und damit aller Erwartungswerte) gibt uns Anlass, hermiteschen Operatoren physikalisch eine ganz zentrale Rolle zuzuordnen:

Wir postulieren: **Jeder physikalischen Observablen ist ein hermitescher Operator zuzuordnen – jeder hermitesche Operator definiert eine Observable.**

Literatur

- [1] Sakurai, Modern Quantum Mechanics
- [2] Messiah, Quantenmechanik I+II
- [3] Griffiths: Introduction to Quantum Mechanics
- [4] Quantenmechanik-Skript von Julius Wess:
<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~hebecker/QM/wess-qm1.pdf>
und <http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~hebecker/QM/wess-qm12.pdf>
- [5] Quantenmechanik-Skript von Timo Weigand:
<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~weigand/Skript-QM2011/skript.pdf>
- [6] Landau/Lifshitz, Quantenmechanik
- [7] Münster: Quantentheorie
- [8] Schwindt: Tutorium Quantenmechanik
- [9] Shankar: Principles of Quantum Mechanics
- [10] Gottfried/Yan: Quantum Mechanics - Fundamentals
- [11] Townsend: A Modern Approach to Quantum Mechanics
- [12] Cohen-Tannoudji/Diu/Laloë: Quantenmechanik
- [13] Nolting, Grundkurs Theoretische Physik, 5/1 und 5/2
- [14] Schwabl: Quantenmechanik
- [15] Jordan: Linear Operators for Quantum Mechanics
- [16] Rynne/Youngson: Linear Functional Analysis

- [17] Reed/Simon: Functional Analysis I + II
- [18] Choquet-Bruhat/DeWitt-Morette/Dillard-Bleick: Analysis, Manifolds and Physics
- [19] Landau/Lifshitz, Feldtheorie
- [20] The Feynman lectures on Physics (Vol. 2)
- [21] Schiff, Quantum Mechanics