

# Theoretische Physik III

## Quantenmechanik

Vorlesung von Prof. Dr. Andreas Buchleitner im Sommersemester 2019

Markus Österle   Damian Lanzenstiel

21. Mai 2019

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
0.1	Wichtige Infos . . . . .	2
0.2	Programm . . . . .	2
0.3	Litaratur . . . . .	2
<b>I</b>	<b>Quantenmechanik - Intro</b>	<b>4</b>
I.1	Wave-particle duality at the double-slit . . . . .	5
I.1.1	Consequences and terminology . . . . .	6
I.2	Measure, filtering and spectral decomposition . . . . .	7
<b>II</b>	<b>Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum</b>	<b>9</b>
II.1	Zustände und Projektoren im Hilbertraum . . . . .	9
II.2	Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren . . . . .	11
II.3	Der Spektralsatz für Normaloperatoren . . . . .	13
II.4	Observablen, vollständige Sätze von Observablen, Tensorräume . . . . .	14
II.4.1	Beispiele: . . . . .	16
II.4.2	Tensor spaces . . . . .	17
<b>III</b>	<b>Dynamik</b>	<b>23</b>
III.1	Die Schrödinger-Gleichung . . . . .	23

# Kapitel 0

## Einleitung

### 0.1 Wichtige Infos

**Professor** Andreas Buchleitner Zi. 901

abu@uni-freiburg.de

buchleitner\_office@physik.uni-freiburg.de

**Sekretäre** Gislinde Bühler & Susanne Trantke Zi. 804

**Übungsleiter** Eduardo Carnio, Zi. 910

eduardo.carnio@physik.uni-freiburg.de

**ILLIAS** Theorie III: Password: TPIIIss19

**Klausur** 15. Juli 13:00 - 16:00 Uhr im großen Hörsaal

### 0.2 Programm

- Proseminar (BSc) zus. mit MSc-Seminar  
QM für Liebhaber & Interpretation of QM
- Kolloquium montags 17:15 Uhr 27. Mai Göttinger Erklärung, CF v. W.
- 23.-27. September DPG Fall Meeting, Quantum Sciences and IT

### 0.3 Litaratur

(auch auf ILLIAS gelistet)

- C. Cohen-Tannodji, B. Diu, F. Lafoë, Mécaunique quantique, F,D,E, Vol I + II
- O. Hittmeier Lehrbuch d. Quantenmechanik, Thienig 1972
- B. - G. Engert, Lectures on quantum mechanics, I - IV, World Scientific 2006
- M. Bartelmann et al, Theoretische Physik, Springer 2015
- J.J. Sakurai, Modern Quantummechanics, Addison-Wesley 1995
- A. Peres, Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer 1995
- M.A. Nielson, I. L. Chang, Quantum Computation & Quantum Information, Cambridge University Press 2000

- Landau & Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd. III

**Formelsammlung:** Bronstein & Semendiciev. Taschenbuch d. Mathematik

# Kapitel I

## Quantenmechanik - Intro

Quantenmechanik (QM) beschreibt den Mikrokosmos (im Gegensatz zum Makrokosmos).

→ im CD-Player

→ im Handy

→ Kernspin

→ Zeitstandards

QM ist „merkwürdig“ insofern, als anthropomorpher Anschauung unangepasst.  $\Rightarrow$  Sie sorgt noch heute für hitzige und kontroverse Debatten.

→ siehe Podcasts PI - Kolloquium, z.B. Nicoles Gisin 15.04.2009, Reinhard Werner 24.12.2007

→ mathematischer Rahmen relativ einfach, doch Interpretation schwierig

$\Rightarrow$  Feynman: „Shut up and calculate!“

**Historische Genese:** Wie (fast?) alle physikalischen Theorien aus experimenteller Evidenz, die mit der „klassischen“ Theorie nicht vereinbar war.

Aus **theoretischer „Notlage“ angesichts bestehender Experimente:**

Balmer-Linien (1885), Franck-Hertz-Versuch (1913), Photoeffekt (Hallweds 1888 & Einstein 1905), Schwarzkörperspektrum (Planck 1900), Compton-Effekt (1921), Kernspaltung (Halm, Meitner und Strassmann 1939), Stern-Gerlach-Versuch (1921).

**Große Namen:** N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, John v. Neumann, A. Sommerfeld, L. de Broglie, P. Dirac, W. Pauli, L. Szilárd, R. Oppenheimer, Gamow, Siegelt, Hellmann, Ettore Majorana.

Zu Majorana: Leonardo Sciascia: La Scomparsa di Majorana (Das Verschwinden des Majorana).

**Buchempfehlung:** Richard Rhodes: Die Atombombe oder die Geschichte des 8. Schöpfungstages

Weitere Quantenmechaniker: E. Teller, A. Sacharov, L. Landau, J. Belt, M. Gutzwiller.

**Korrespondenzprinzip:** Wie korrespondieren die QM-Theorien mit den klassischen Theorien? Wie sieht der Übergang vom diskreten zu einem kontinuierlichen Spektrum aus?

**Beispiel:** Atommodell mit quantisierten Elektronen-Orbitalen von Bohr und dem Klassischen Modell von Rutherford und kontinuierlichen Kepler-Orbitalen.

Die Energieniveaus eines Wasserstoff Atoms sind:  $E = \frac{1}{2n^2}$ . Daraus folgt, dass höhere Energieniveaus immer näher aneinander liegen. Die Energiedifferenzen  $E_{n+1} - E_n \sim \hbar\omega_{\text{Kepler}}$  werden also immer geringer. Die Umlauffrequenz kann also mit zunehmender Hauptquantenzahl immer genauer bestimmbar.

## I.1 Wave-particle duality at the double-slit

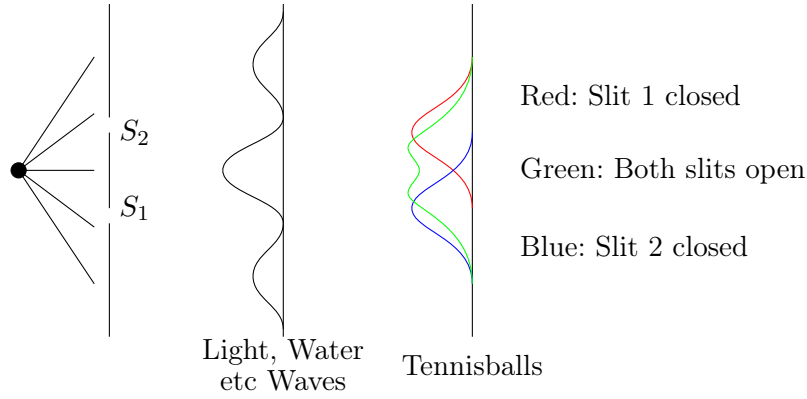


Abbildung I.1: Double-slit Experiment by Young (1803)

**For Waves** the complex amplitudes  $E_1(x)$  and  $E_2(x)$  coming from slits 1 and 2 and arriving at point  $x$  on the screen add up

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \quad (\text{I.1})$$

The corresponding intensity reads:

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = \underbrace{|E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2}_{\substack{\text{"classical" intensities} \\ \text{e.g. with Tennis balls} \\ \text{ladder contribution}}} + \underbrace{2\Re(E_1^*(x)E_2(x))}_{\substack{\text{interference term} \\ \sim \cos(\varphi_2(x) - \varphi_1(x)) \\ \text{contains phase information} \\ \text{cross term}}} \quad (\text{I.2})$$

$$|E_1 + E_2|^2 = (E_1 + E_2)(E_1^* + E_2^*) = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\Re(E_1^*E_2)$$

ladder contribution	cross contribution
$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_1^*} \\ E_2 \text{ --- } E_2^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_2^*} \\ E_2 \text{ --- } E_1^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$
$ E_1 ^2 +  E_2 ^2$	$+ \quad 2\Re(E_1^*E_2)$

→ **Light is a wave phenomenon**

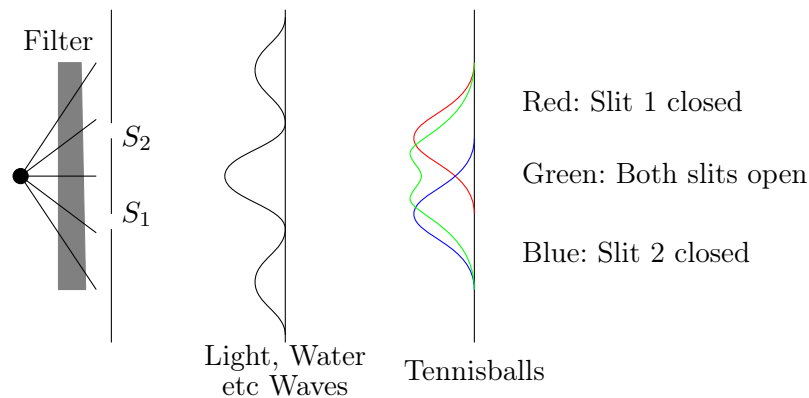


Abbildung I.2: T3 Doppelspalt mit Filter

If we make the source weaker and weaker and have a sufficiently sensitive screen/detector, we observe the arrival of **single point-like** photons on the screen (photo-electric effect Einstein (1905) ( $\rightarrow$  corpusculan hypothesis))

By making the source sufficiently weak, we can ensure that at most 1 photon is present in the interferometer at a given time.  $\rightarrow$  no possible interaction between photons!

If we **integrate** over many single detection events, we recover the interference pattern.

We can make statistical predictions about the position of individual detection events (the integrated signal forms a probabilistic distribution) but the individual photons clearly don't have a deterministic trajectory (otherwise no interference).

## Summary

- Upon detection, light behaves like an assembly of particles.
- The density of detection events reproduces the predictions of the wave picture (classical electromagnetism).
- We cannot explain the appearance of an interference pattern if we treat the photons as classical particles. Each photon goes through both slits 1 and 2: two classically exclusive alternatives.

### I.1.1 Consequences and terminology

The agreement of the probability distribution for individual detections events with the predictions of optics (classical field theory) justifies referring to  $E(x, t)$  as a **probability amplitude** of the photons.  $|E(x, t)|^2$  is the corresponding **probability density** (normalized, real, other attributes ...) for detection at point  $x$  and time  $t$ . Later on, we use  $\psi(x, t)$  instead of  $E(x, t)$  for the **wavefunction**.

The appearance of both wave and particle properties in the behavior of microscopic objects is known as **wave-particle duality**.

This raises the question of the “**critical scale**” below which these phenomenon take place and above which our classical representations hold.

**Remarks:**

- I) In optics, interference follows from the superposition principle, which is a consequence of the linearity of the field equations.

Correspondingly the equations of QM are also linear and the superpositions principle applies.

- II) The probabilistic predictions of the wave picture can only be accessed by accumulating many individual detection events, i.e. by repeating the same experiment.

Individual events are not predictable, QM only makes statistical predictions.

- III) There is a strong effect to push this critical scale function into the macroscopic world (e.g. experiments M. Arndt, Vienna interference of  $C_{60}$  molecules).

## I.2 Measure, filtering and spectral decomposition

(Messung, Filterung und spektrale Zerlegung)

Classical field:

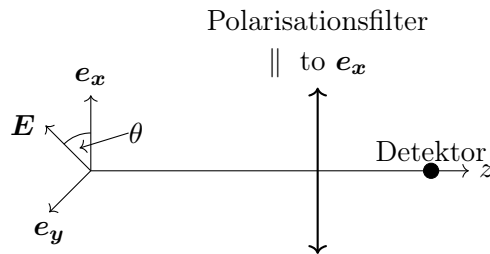


Abbildung I.3: Linearly polarized beam of monochromatic light

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \hat{e}_p e^{i(kz - \omega t)} \quad (\text{I.3})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)} \\ & + E_0 \sin \theta \mathbf{e}_y e^{i(kz - \omega t)} \end{aligned}$$

After the filter

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$$

Intensity:

$$I' \propto |E'|^2 \quad I \propto |E|^2$$

### Malus' law

$$I' = I \cos^2 \theta \quad (\text{I.4})$$

What happens if we weaken the source to obtain single photons?

→ 2 possible options:

- a single photon passes completely (click on detector): event "1"
- or it does not pass at all (no click): event "0"



For each photon, the outcome cannot be predicted with certainty.

Upon averaging over a large number of photons, the fraction which makes it through is:

$$\frac{N_1}{n_1 + n_0} \rightarrow \cos^2 \theta$$

in accordance with Malus' law (I.4).

E.g.: 10010001110101

Special cases:

- $\theta = 0^\circ \rightarrow$  all photons go through: 1111...1
- $\theta = 90^\circ \rightarrow$  no photon goes through: 0000...0

$\Rightarrow$  in this case the output is certain but experiment must be repeated many times to prove that this is the case.

In these cases, we say that the photon finds itself in an **eigenstate**. One state:  $|1\rangle$  for  $\hat{e}_x$  polarized and one state  $|0\rangle$  for  $\hat{e}_y$  polarized which is associated with the particular outcomes for **eigenvalues** 1 and 0.

Sichere (Quanten-) Ereignisse gibt es allein für  $\hat{e}_p = \hat{e}_x$  bzw.  $\hat{e}_p = \hat{e}_y$ . Diese Polarisationsrichtungen definieren die **Eigenzustände**  $|1\rangle$  ( $\hat{e}_x$ ) bzw.  $|0\rangle$  ( $\hat{e}_y$ ) zu den **Eigenwerten** 1 bzw. 0.

Für eine allgemeine Wahl von  $\hat{e}_p$  haben wir die Orthogonalzerlegung

$$\hat{e}_p = \hat{e}_x \cos \theta + \hat{e}_y \sin \theta \quad (\text{I.5})$$

Die Wahrscheinlichkeit für „0“ **oder** „1“ ergibt sich als:

$$\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1 \quad (\text{I.6})$$

wie gewünscht.

(I.5) kann als „**spektrale Zerlegung**“ des Polarisationszustandes  $\hat{e}_p$  in die durch den Mesapparat/Filter definierten Eigenzustände  $\hat{e}_x$  und  $\hat{e}_y$  bzw.  $|1\rangle$  und  $|0\rangle$ .

Lässt man Photonen, die durch  $F$  transmittiert werden, durch einen weiteren Filter  $F'$  der selben Orientierung wie  $F$  gehen, so folgt ein **sicheres** Ereignis, da das Photon durch  $F$  im Eigenzustand  $\hat{e}_x$  von  $F'$  **präpariert** wurde.

In diesem Sinne: Zustandspräparation  $\equiv$  Filterung (-smessung)

### **Bemerkung**

- (1) Um sich davon zu überzeugen, dass das System in einem Eigenzustand präpariert wurde, muss Statistik über viele ( $N \gg 1$ ) Photonen betrieben werden.
- (2) (I.5) und (I.6) legen bereits die essentielle Vektorraumstruktur des QM mit vorzugsweise orthonormierten Basisvektoren fest.
- (3) Systeme, die sich mit  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  vollständig beschreiben lassen heißen: **Zweiniveausysteme**

## Kapitel II

# Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum

Nun die etwas mathematischere Fassung, die letztlich (streng) durch die Theorie selbst-adjungierter Operatoren im Hilbertraum gegeben ist <sup>1</sup>. Ziel der mathematischen Darstellung, ist letztlich eine geometrische Anschauung des Hilbertraums.

### II.1 Zustände und Projektoren im Hilbertraum

Zustandsvektor, abstrakt geschrieben:  $|\psi\rangle^2$  (stellt  $\hat{e}_p$ ), entsprechend  $|1\rangle$  statt  $\hat{e}_x$ ,  $|0\rangle$  statt  $\hat{e}_y$ ,  $c_1$  statt  $\cos\theta$ ,  $c_0$  statt  $\sin\theta$  in (I.5),

$$\Rightarrow |\psi\rangle \stackrel{(I.5)}{=} c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (II.1)$$

wobei wir außerdem  $c_0$  und  $c_1$  kompaktwertig wählen <sup>3</sup>

Gemäß (II.1) ist  $|\psi\rangle$  ein Vektor in einem komplexen, zweidimensionalen Vektorraum, der zusätzlich mit dem **kanonischen Skalarprodukt**  $(\cdot, \cdot)$  verziert sein soll.

$$\begin{aligned} c_0 &= (|0\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 0|\psi\rangle & c_1 &= (|1\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 1|\psi\rangle \\ |c_0|^2 + |c_1|^2 &= 1 \quad (\text{s.o. (I.5) und (I.6)}) & \langle 0|1\rangle &= \langle 1|0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (II.2)$$

Verallgemeinerung dieser Struktur auf Vektorraum  $\mathcal{H}$  mit abzählbarer Dimension  $\dim \mathcal{H} =: d_{\mathcal{H}}$ , das zusätzlich vollständig<sup>45</sup> bzgl. des durch das iobige Skalarprodukt induzierter Norm:

$$\|\cdot\| = (\cdot, \cdot)^{1/2} \quad (II.3)$$

sein soll. Ein solcher Vektorraum heißt **Hilbertraum**.

Weitere Schreibweisen für  $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) &= \left( (\varphi_1, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}})^\top, (\psi_1, \dots, \psi_{d_{\mathcal{H}}})^\top \right) = (\varphi_1^*, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \varphi_j^* \psi_j = \langle \varphi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (II.4)$$

<sup>1</sup>s. linear Operations in Hilbertspace, Joachim Weidmann, Springer-Vlg

<sup>2</sup>Diese Schreibweise kommt aus der notation von „maps to“  $\mapsto$  und wurde später zu  $|\dots\rangle$ .

<sup>3</sup>siehe Übungsaufgabe zu ellipisch polarisierten EM-Wellen

<sup>4</sup>d.h. alle Cauchy-Folgen konvergieren in  $\mathcal{H}$ .

<sup>5</sup>s. z. B. Barner, Flohr, Analysis I, S1199, Analysis II, S145

Damit festgelegt:

$$|\psi\rangle = (\psi_1 \ \dots \ \psi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix}$$

$$\langle\varphi| = (\varphi_1^* \ \dots \ \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) = \left(|\varphi\rangle^{\top}\right)^* =: |\varphi\rangle^{\dagger} \quad (\text{II.5})$$

$|\varphi\rangle^{\dagger} = \langle\varphi|$  heißt der zu  $|\varphi\rangle$  **adjungierte** Vektor, „†“ wird „kreuz“, „cross“, „dagger“ gelesen. Analog zu (II.1) können wir jedem Zustand  $|\psi\rangle$  in der zugehörigen Orthonormalbasis (ONB) die Darstellung:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \langle j|\psi\rangle |j\rangle \quad (\text{II.6})$$

Wir fordern die Normierung der Wellenfunktion  $\psi$ :

$$\langle\psi|\psi\rangle = ||\psi||^2 = 1 \quad (\text{II.7})$$

$$(\text{II.6}) \quad \hat{=} \quad \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

zuordnen.

$$|\psi\rangle = \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

### Zerlegung der Eins / Vollständigkeitsrelation

$$\Rightarrow \sum \underbrace{|j\rangle\langle j|}_{\text{Projektor}} = \mathbb{1} = (\text{id}) \quad (\text{II.8})$$

Die Zerlegung der Eins  $\equiv$  Identität in die „**Projektionsoperatoren**“

$$|j\rangle\langle j||j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|$$

$|j\rangle\langle j|$  nennt man auch das **dyadische Produkt** von  $|j\rangle$  mit sich selbst.

$$P_j = |j\rangle\langle j| \quad (\text{II.9})$$

Man sieht leicht, dass die „**Idempotenz**“ der  $P_j$ :

$$P_j^2 = P_j \quad \forall j \quad (\text{II.10})$$

Zu jedem  $P_j$  definieren wir die „**Orthogonalprojektion**“

$$Q_j := 1 - P_j \quad (\text{II.11})$$

Hier gilt häufig  $1 := \mathbb{1} = \text{id}$

Eine andere Schreibweise für  $\langle j|\psi\rangle$  ist  $\psi = \sum_j (\hat{e}_j, \psi) \hat{e}_j$ . Außerdem gilt:  $\langle\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$

$$P_j \cdot Q_j = Q_j \cdot P_j = P_j - \underbrace{P_j^2}_{\substack{(\text{II.10}) \\ P_j}} = 0 \quad (\text{II.12})$$

Vollständig konsistent mit der geometrischen Anschauung orthogonaler Projektionen.

Gleiches lässt sich für Summen von Projektoren sagen:

$$P = \sum_{j=1}^M P_j \quad Q = 1 - P = \sum_{j=M+1}^{s_{\mathcal{H}}} P_j \quad (\text{II.13})$$

$$P^2 = P \quad Q^2 = Q \quad PQ = QP = 0 \quad (\text{II.14})$$

Man erinnere sich an das Beispiel in (I.2)

★hier fehlt eine Grafik★

## Bemerkungen

- (a) Die abstrakte Schreibweise  $|\psi\rangle$  bzw.  $\langle\psi|$  geht auf Dirac zurück, daher auch „**Dirac- Notation**“ genannt.
- (b)  $|\psi\rangle$  nennt auch (Zustands-) „**Ket**“ (-Vektor),  $\langle\psi|$  entsprechend „**Bra**“ ( $\rightarrow$  Bracket /Klammer). In etwas mathematischerer Weise wird  $\langle\psi|$  auch als das zu  $|\psi\rangle$  gehörende lineare Funktional im zu Hilbertraum  $\mathcal{H}$  dualen Raum aufgefasst, das vermöge (II.4) jedem Ket  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  die Zahl  $(|\psi\rangle, |\phi\rangle \stackrel{(II.4)}{=} \langle\psi|\phi\rangle)$  zuordnet <sup>6 7</sup>.
- (c) In (II.1, 4-6, 8) haben wir ein bestimmtes, durch vorgegebene, orthogonale Filterstellungen definiertes Basissystem  $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |j\rangle, \dots\}$  gewählt. Dies entspricht den Eigenvektoren unseres Messoperators (siehe (I.2)) die auf ein eindeutiges Messresultat führen. Durch die (a priori beliebige) Wahl einer bestimmten ONB wählt man eine bestimmte „**Darstellung**“<sup>8</sup>, die man natürlich wechseln kann (z.B. durch Drehung des Basissystems).

## II.2 Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren

Die oben eingeführten Projektoren  $P_j$  sind offenbar **lineare** Operatoren, denn es gilt:

$$P_j(\lambda|\phi\rangle + \mu|\psi\rangle) = \lambda P_j|\phi\rangle + \mu P_j|\psi\rangle \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C}, |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (II.15)$$

Im Folgenden werden wir es ganz allgemein mit linearen Operatoren auf Hilberträumen zu tun haben, die auf Kets gemäß

$$A|u\rangle = |v\rangle \quad (II.16)$$

und auf Bras gemäß

$$\langle s|B = \langle t| \quad (II.17)$$

operieren. Man sagt  $A$  wirkt in (II.16) „nach rechts“ und  $B$  in (II.17) „nach links“. Interessiert man sich für die Wirkung von  $A$  aus (II.16) für einen Bra  $\langle w|$ , so verschafft man sich zunächst die Wirkung von  $A$  auf eine vollständige (Ket-) Basis:

$$A|j\rangle = |j'\rangle \quad \forall j = 1, \dots, d_{\mathcal{H}} \quad (II.18)$$

daraus, die „**Matrixelemente**“

$$\langle w|A|j\rangle = \langle w|j'\rangle \quad (II.19)$$

(wird auch als  $A_{wj}$  geschrieben) was die Darstellung:

$$\langle w|A \stackrel{*}{=} \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j| \quad (II.20)$$

Bei  $*$  spricht man auch vom Einsetzen/Anwenden von rechts „der Eins“. Entsprechend gilt:

$$A|u\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.21)$$

Daher gilt:

$$\langle w|A|u\rangle \stackrel{(II.20)}{=} \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j|u\rangle \stackrel{(II.21)}{=} \sum_j \langle w|j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.22)$$

<sup>6</sup>Cohen-Tannodji, TI Chap. II B2 b, p110

<sup>7</sup>Sakurai, p.13

<sup>8</sup> $\rightarrow$ Analogie „darstellende Matrix“ in Lin. Algebra, z.B. Fischer, Vieweg 1984 p.186 f.

Der zu  $A$  in (II.16) „**adjungierte**“ Operator  $A^\dagger$  ist dadurch definiert, dass er auf  $\langle u|$  genauso operiert wie  $A$  auf  $|u\rangle$ , d.h. für beliebige  $|u\rangle, |v\rangle$  in (II.16):

$$\langle u|A^\dagger = \langle v| \quad (II.23)$$

Dies impliziert wegen (II.5)

$$\begin{aligned} \langle v| &\stackrel{(II.5)}{=} \left( |v\rangle^\top \right)^* \stackrel{(II.16)}{=} \left( (A|u\rangle)^\top \right)^* \stackrel{(II.21)}{=} \left( \sum_j |j\rangle \langle j| A|u\rangle \right)^{\top*} \\ &= \left( \sum_j \langle j| A|u\rangle |j\rangle^\top \right)^* = \sum_j \langle j| A|u\rangle^* \langle j| \\ &\stackrel{(II.8)}{=} \sum_j \langle u| A^\dagger |j\rangle \langle j| \quad \text{und insbesondere für} \quad \langle u| A = \langle v| \end{aligned} \quad (II.24)$$

$$\langle j| A|u\rangle^* = \langle u| A|j\rangle \quad (II.25)$$

d.h. die Matrixdarstellung von  $A$  geht durch Transposition und komplexe Konjugation in sich selbst über, bzw. die Matrixdarstellung von  $A$  ist bis auf komplexe Konjugation symmetrisch (bzgl. Spiegelung an der Diagonalen).

Kürzer:

$$A^\dagger \stackrel{(II.4)}{=} \stackrel{(II.5)}{=} (A^\top)^* = (A^*)^\top = A \quad (II.26)$$

$A$  heißt dann „**hermitesch**“.

kurze Wiederholung

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum \langle j|\psi\rangle |j\rangle \quad \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle d_{\mathcal{H}}|\psi\rangle \end{pmatrix} \\ \langle j| A|u\rangle &\stackrel{(II.25)}{=} \langle u| A|j\rangle \\ A_{ju}^* &\quad A_{uj} \end{aligned}$$

### **Bemerkung:**

- (a) Häufig wird „**hermitesch**“ synonym mit dem Begriff „selbsadjungiert“ gebraucht, was jedoch nur in endlichdimensionalen Hilberträumen korrekt ist. D.h. es ist gut für viele aber eben nicht für alle Anwendungen<sup>9</sup>. I.a. muss für Selbstadjungiertheit noch fordern, dass der Definitionsbereich von  $A$  mit jedem von  $A^\dagger$  übereinstimmt<sup>10</sup>.

### **Etwas formale Definition (nach <sup>9</sup>)**

Sei  $A$  ein Operator auf  $\mathcal{H}$  mit dem Definitionsbereich  $D(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$ .  $D(A^\dagger) \equiv$  die Menge aller  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  zu denen ein  $|\eta\rangle \in \mathcal{H}$  existiert, derart, dass (s.o. (II.4)). **★hier fehlt was★**

$$(|\phi\rangle, A|\psi\rangle) = (|\eta\rangle, |\psi\rangle) \quad \forall |\psi\rangle \in D(A)$$

**★hier fehlt was★**

<sup>9</sup>M. Reed, B Simon, Methods in Modern Mathematical Physics, Academie Press, Vol I-IV.

<sup>10</sup>→ z.B. R- S, Vol I, p.255; I.a.  $D(A) \subset D(A^\dagger)$

- (b) Statt „hermitesch“ wird in der mathematischen Literatur auch der Begriff „**symmetrisch**“ gebraucht.
- (c) In der mathematischen Literatur wird statt  $A^\dagger$  auch häufig  $A^*$  geschrieben, was zwingend zu Durcheinander führen muss<sup>11</sup>.
- (d) Wir fassen die Wirkung der Operation „ $\dagger$ “ (Adjunktion) auf Skalare, Vektoren und Operatoren zusammen:

$$\begin{aligned}\langle u|v\rangle^\dagger &\stackrel{\text{Skalar}}{=} \langle u|v\rangle^* \stackrel{\text{Skalarprodukt}}{=} \langle v|u\rangle \\ |u\rangle^\dagger &= \langle u| \\ (AB|u\rangle)^\dagger &= \left[(AB|u\rangle)^\top\right]^* = \left[(|u\rangle)^\top B^\top A^\top\right]^* \stackrel{\text{(II.26)}}{=} \langle u|B^\dagger A^\dagger\end{aligned}\quad (\text{II.27})$$

- (e) Die Projektoren  $P_j$  aus (II.9) sind offenbar selbsadjungiert

$$\begin{aligned}P_j &= |j\rangle\langle j| \\ \left((P_j)^\top\right)^* &= \left[(|j\rangle\langle j|)^\top\right]^* = \left[(\langle j|)^\top (|j\rangle)^\top\right]^* = |j\rangle\langle j|\end{aligned}$$

- (f) Eine etwas größere Klasse von Operatoren sind die sogenannten „**Normaloperatoren**“, die durch die Eigenschaft:

$$AA^\dagger = A^\dagger A \quad \left[A, A^\dagger\right] = AA^\dagger - A^\dagger A = 0 \quad (\text{II.28})$$

definiert sind.

- (g) Ein linearer Operator  $A$  heißt „**invertierbar**“ mit dem **inversen Operator**  $A^{-1}$ , wenn die durch (II.16) definierte Abbildung **eindeutig umkehrbar** ist. Es also einen Operator  $A^{-1}$  mit der Eigenschaft:

$$|u\rangle = A^{-1}|v\rangle \quad \forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H} \quad \text{im Sinne von (II.16)}$$

gibt.

## II.3 Der Spektralsatz für Normaloperatoren

Der womöglich zentralste Satz der Funktionalanalysis für die Quantenmechanik:

Jeder Normaloperator  $A$  lässt sich schreiben als:

$$A = \sum_a a|a\rangle\langle a| = \sum_a aP_a \quad (\text{II.30})$$

mit Eigenvektoren  $|a\rangle$  von  $A$  d.h.

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad P_a = |a\rangle\langle a| \quad (\text{II.31})$$

Jede in eine Potenzreihe entwickelbare Funktion  $f(A)$  von  $A$  ist dann darstellbar als:

$$f(A) = \sum_a f(a)|a\rangle\langle a| = \sum_a f(a)P_a \quad (\text{II.32})$$

---

<sup>11</sup>→ RS I, p.252

Zur Verdeutlichung: Es gilt allgemein dass:

$$|a\rangle = \sum_j \langle j|a\rangle |j\rangle$$

Z.B.:

$$|\psi_t\rangle = \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)|\psi_0\rangle = \sum_j \exp(-iE_j t/\hbar)|E_j\rangle \langle E_j|\psi_0\rangle$$

**Beweisskizze:**

[  $A$  Normaloperator  $\Rightarrow$  (II.30); „ $\Leftarrow$ “ in den Übungen]

Sei  $|a_1\rangle$  ein (normierter) Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $a_1$ ,

$$A|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle \quad (\text{i})$$

Aus (II, 5, 16, 23)

$$\langle a_1|A^\dagger = \langle a_1|a_1^* \quad (\text{ii})$$

Also gilt  $\langle a_1|A|a_1\rangle = a_1$  und  $\langle a_1|A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*$ . Aus der letzteren Gleichung folgt (siehe (II.11))

$$A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*|a_1\rangle + |b\rangle \quad (\text{iii})$$

mit

$$\langle a_1|b\rangle = 0 \quad (\text{iv})$$

Nach Voraussetzung ist  $A$  normal, d.h.

$$\begin{aligned} \langle a_1|AA^\dagger - A^\dagger A|a_1\rangle &= \langle a_1|AA^\dagger|a_1\rangle - \underbrace{\langle a_1|A^\dagger A|a_1\rangle}_{|a_1|^2 \langle a_1|a_1\rangle = |a_1|^2} \\ &\stackrel{(*)}{=} (\langle a_1|a_1 + \langle b|)(a_1^*|a_1\rangle + |b\rangle) - |a_1|^2 \\ &= |a_1|^2 + \langle b|b\rangle - |a_1|^2 = \langle b|b\rangle \\ &\stackrel{\text{L.S.}}{=} [A, A^\dagger] = 0 \end{aligned}$$

Bei (\*) wurden die Gleichungen (i), (ii), (iii) und (iv) verwendet.

$$\Rightarrow |b\rangle = 0, \quad A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*|a_1\rangle \quad \text{bzw} \quad \langle a_1|A = \langle a_1|a_1$$

Im nächsten Schritt definieren wir  $A' := A - a_1|a_1\rangle\langle a_1|$ . Dann verschwindet  $A'$  auf  $|a_1\rangle$  und auf  $\langle a_1|$  wegen (iv). Sei  $|a_2\rangle$  Eigenvektor von  $A'$  mit Eigenwert  $a_2$  und  $\langle a_1|a_2\rangle = 0$ . Danach Verfahren wie oben mit  $|a_1\rangle$ , etc, um schließlich die Darstellung  $A - \sum_l a_l|a_l\rangle\langle a_l| = 0$  zu gewinnen  $\rightarrow$  Behauptung.

## II.4 Observablen, vollständige Sätze von Observablen, Tensorräume

**Bisher:** Hilbertraumstruktur erschlossen aus der Wirkung von Polarisationsfiltern auf Photon wohldefinierter Eingangspolarisation, daraus folgte die Dimension des Hilbertraums.

Jetzt **allgemeiner:** Selbstadjungierte Operatoren  $A$ , deren Eigenvektoren eine Orthonormalbasis des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  darstellen, mit anderen Worten: der Vollständigkeitsrelation (II.8) genügen, bezeichnen wir als „**Observable**“.

Dies stellt jedoch nicht sicher, dass die Basisvektoren von  $\mathcal{H}$  durch das Eigenwertspektrum von  $A$  eindeutig unterscheidbar sind, da letztere entartet sein können.

Daher bedarf es i.d.R. eines „**vollständigen Satzes von Observablen**“  $A, B, C, \dots$  derart, dass:

- a)  $A, B, C, \dots$  paarweise **kommutieren** (oder auch „vertauschen“), d.h.  $AB = BA$ ,  $AC = CA$ ,  $BC = CB$ , ... oder, in der üblichen **Kommutator-Schreibweise**  $[A, B] = 0$ ,  $[A, C] = 0$ ,  $[B, C] = 0$  ... mit

$$[A, B] = 0 = AB - BA \quad (\text{II.33})$$

Die Vertauschbarkeit impliziert, dass  $A, B, C, \dots$  gleichzeitig diagonalisierbar sind, d.h. eine gemeinsame Eigenbasis besitzen (Beweis s.u.).

- b) Die Eigenwerte  $\{a_j, b_j, c_j, \dots\}$  von  $A, B, C, \dots$  erlauben die **eindeutige** Identifikation jedes Eigenvektors.  $\{a_j, b_j, c_j, \dots\}$  heißen dann für den jeweiligen Eigenzustand charakteristische „**Quantenzahlen**“.

### Beweis

**Beweis der Äquivalenz von Vertauschbarkeit und Existenz einer gemeinsamen Basis zweier selbstadjungierten Operatoren  $A$  und  $B$ .**

- (i) **gemeinsames Eigenbasis  $\Rightarrow$  Vertauschbarkeit**

Sei  $|c\rangle$  Eigenvektor von  $A$  und  $B$ , mit  $A|c\rangle = a|c\rangle$  und  $B|c\rangle = b|c\rangle$  so folgt:

$$AB|c\rangle = bA|c\rangle = ba|c\rangle = ab|c\rangle = aB|c\rangle = Ba|c\rangle = BA|c\rangle$$

Gilt dies (nach Voraussetzung) für alle Eigenvektoren von  $A$  und  $B$ , dann auch für alle Vektoren in  $\mathcal{H}$ .

- (ii) **Vertauschbarkeit  $\Rightarrow$  Existenz einer gemeinsamen Eigenbasis**

Zunächst sollen  $A$  und  $B$  jeweils nichtentartete Spektren haben. Dann folgt aus  $A|a\rangle = a|a\rangle$  und  $AB = BA$ , dass  $AB|a\rangle = BA|a\rangle = aB|a\rangle$ , d.h.  $B|a\rangle$  ist Eigenvektor von  $A$  ( $A(B|a\rangle) = a(B|a\rangle)$ ) zum selben Eigenwert  $a$ , d.h. wegen Nichtentartung der Spektren,  $B|a\rangle = \lambda|a\rangle$ , daher  $|a\rangle$  auch Eigenvektor von  $B$ .

Ist dagegen  $a$  ein entarteter Eigenwert von  $A$ . Dann lässt sich jeder Eigenvektor  $|a_n\rangle$  von  $A$  aus dem zu  $a$  gehörigen, entarteten Unterraum schreiben als

$$|a_n\rangle = \sum_b \langle b|a_n\rangle |b\rangle$$

mit  $B|b\rangle = b|b\rangle$ . Da  $|a_n\rangle$  Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $a$ , folgt

$$\sum_b (A - a) \langle b|a_n\rangle |b\rangle = 0$$

Angenommen,  $(A - a)|b\rangle \neq 0$ , dann gilt, wegen  $AB = BA$ ,

$$B(A - a)|b\rangle = (A - a)B|b\rangle = b(A - a)|b\rangle$$

, d.h.  $(A - a)|b\rangle$  ist Eigenvektor von  $B$ , also  $(A - a)|b\rangle$  linear unabhängig  $\forall |b\rangle \Rightarrow \langle b|a_n\rangle = 0 \Rightarrow \nexists$

Ergo  $(A - a)|b\rangle = 0 \forall |b\rangle \Rightarrow |b\rangle$  ist Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $a$ .  $\Rightarrow \{|b\rangle\}$  definiert eine gemeinsame Basis von  $A$  und  $B$  !

Es wurde die folgende Schreibweise als Abkürzung benutzt:

$$„A - a“ \hat{=} A - a\mathbb{1}$$

[Verallgemeinerung für Observablen  $A, B, C, \dots$  analog (paarweise)]



(inspiriert durch die sogenannte  $\Lambda$ -Konfiguration z.B. in Ionen-fallen-Physik/ion trap physics)

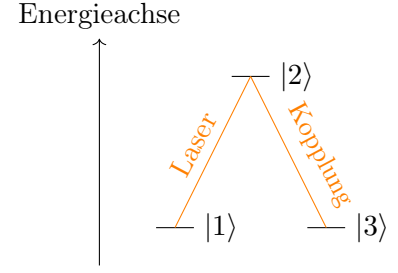


Abbildung II.1: Beispielhafte Darstellung der Zustände eines Quantensystems.

### II.4.1 Beispiele:

Wir betrachten einen dreidimensionalen Hilbertraum mit Basisvektoren  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$  (Euklidische Orthonormalbasis), sowie Operatoren  $H$  und  $B$  mit folgender Matrixdarstellung (in der gegebenen Basis)

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.34})$$

$\hbar, \omega_0, b$  reell

- (a) Offenbar sind  $B$  und  $H$  selbstadjungiert (siehe (II.26))
- (b) Aus der Matrixdarstellung von  $H$  und  $B$  in  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  folgt sofort, dass  $|u_1\rangle$  ein  $H$  und  $B$  gemeinsamer Eigenvektor ist; entsprechend:

$$HB|u_1\rangle = BH|u_1\rangle \quad (\text{II.35})$$

#### Beispiel zu (b)

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega_0 (|u_1\rangle\langle u_1| - |u_2\rangle\langle u_2| - |u_3\rangle\langle u_3|) \\ B &= b (|u_1\rangle\langle u_1| + |u_2\rangle\langle u_3| + |u_3\rangle\langle u_2|) \end{aligned}$$

Bleibt nun noch der durch  $|u_2\rangle$  und  $|u_3\rangle$  aufgespannte, orthogonale Unterraum zu untersuchen:  $\mathcal{H}_2 = \text{span}\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

Der Projektor auf  $\mathcal{H}_2$

$$P_2 := |u_2\rangle\langle u_2| + |u_3\rangle\langle u_3| \quad (\text{II.36})$$

(Vergleiche (II.13))

erlaubt die Einschränkung von  $H$  und  $B$  auf  $\mathcal{H}_2$  vermöge

$$P_2 H P_2 = -\hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\hbar\omega_0 \mathbb{1}_2 \quad (\text{II.37})$$

$$P_2 B P_2 = b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.38})$$

Wegen (II.37) kommutieren  $H$  und  $B$  somit auf ganz  $\mathcal{H}$ .

Man überzeugt sich leicht davon, dass

$$\begin{aligned} |p_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle + |u_3\rangle) \\ |p_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle - |u_3\rangle) \end{aligned}$$

orthogonale Eigenvektoren von  $P_2 B P_2$  mit Eigenwerten  $b$  und  $-b$  sind.

	Eigenwert von H	Eigenwert von B
$ u_1\rangle$	$\hbar\omega_0$	$b$
$ p_2\rangle$	$-\hbar\omega_0$	$b$
$ p_3\rangle$	$-\hbar\omega_0$	$-b$

## II.4.2 Tensor spaces

$\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B, \mathcal{H}_C$  Hilbert spaces

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \quad \text{Hilbert space}$$

$$\begin{aligned} A|a\rangle &= a|a\rangle \quad , \quad |a\rangle \in \mathcal{H}_A \\ B|b\rangle &= b|b\rangle \quad , \quad |b\rangle \in \mathcal{H}_B \\ C|c\rangle &= c|c\rangle \quad , \quad |c\rangle \in \mathcal{H}_C \end{aligned}$$

$$|a\rangle \otimes |b\rangle \otimes |c\rangle := |a\rangle|b\rangle|c\rangle := |a, b, c\rangle \quad (\text{II.44})$$

Auch genannt „tripatit“ oder „multipatit“ und auf englisch „multipartition“. Erweiterungen von  $A, B$  tec. auf  $\mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} A &\rightarrow A \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \dots \\ B &\rightarrow \mathbb{1} \otimes B \otimes \mathbb{1} \dots \end{aligned}$$

- $\mathcal{H}$  is a vector space

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

$$\begin{aligned} \lambda(|a\rangle \otimes |b\rangle) &= (\lambda|a\rangle) \otimes |b\rangle \quad \forall \lambda \in \mathbb{C} \\ &= |a\rangle \otimes (\lambda|b\rangle) \quad \forall |a\rangle \in \mathcal{H}_A, \forall |b\rangle \in \mathcal{H}_B \\ (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle &= |a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \\ |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle) &= |a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle \end{aligned}$$

- $\dim \mathcal{H} = ?$

$$\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$$

$$\text{Basis } \mathcal{H}_A : \{|a_j\rangle\}_{j=1 \dots \dim \mathcal{H}_A}$$

$$\mathcal{H}_B : \{|a_k\rangle\}_{k=1 \dots \dim \mathcal{H}_A}$$

$$\text{Basis } \mathcal{H} : \{|a_j\rangle \otimes |b_k\rangle\}_{\substack{j=1 \dots \dim \mathcal{H}_A \\ k=1 \dots \dim \mathcal{H}_B}}$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle & |\phi\rangle &\in \mathcal{H}_A \\ & & |\chi\rangle &\in \mathcal{H}_B \end{aligned}$$

$$|\phi\rangle = \sum_j c_j |a_j\rangle$$

$$|\chi\rangle = \sum_k d_k |b_k\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \left( \sum_j c_j |a_j\rangle \right) \otimes \left( \sum_k d_k |b_k\rangle \right) \\ &= \sum_{jk} c_j d_k |a_j\rangle \otimes |b_k\rangle \end{aligned}$$

**Example** Polarizer  $\mathcal{H} = \text{span}\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} = \text{span}\{|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle\}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |1\rangle$$

- Scalar product:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \\ |\psi\rangle &= |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \\ |\xi\rangle &= |\eta\rangle \otimes |\zeta\rangle \\ \langle\psi|\xi\rangle &= (\langle\phi| \otimes \langle\chi|)(|\eta\rangle \otimes |\zeta\rangle) = \langle\phi|\eta\rangle \cdot \langle\chi|\zeta\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_{jk} c_{jk} |a_j\rangle \otimes |b_k\rangle \\ |\xi\rangle &= \sum_{lm} d_{lm} |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle \\ \langle\psi|\xi\rangle &= \left( \sum_{jk} c_{jk}^* \langle a_j| \otimes \langle b_k| \right) \left( \sum_{lm} d_{lm} |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle \right) \\ &= \sum_{jklm} c_{jk}^* d_{lm} \underbrace{\langle a_j|a_l\rangle}_{\delta_{jl}} \underbrace{\langle b_k|b_m\rangle}_{\delta_{km}} = \sum_{jk} c_{jk}^* d_{jk} \\ \langle\psi|\xi\rangle &= \langle\phi|\eta\rangle \cdot \langle\chi|\zeta\rangle\end{aligned}$$

- **Operators**  $A$  acts on  $\mathcal{H}_A$ ,  $B$  acts on  $\mathcal{H}_B$

$$\begin{aligned}A &\rightarrow (A \otimes \mathbb{1}_B) \\ B &\rightarrow (\mathbb{1}_A \otimes B)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(A \otimes \mathbb{1}_B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= (A|\phi\rangle) \otimes |\chi\rangle \\ (\mathbb{1}_A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= |\phi\rangle \otimes (B|\chi\rangle)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A|a\rangle &= a|a\rangle \\ B|b\rangle &= b|b\rangle \\ (A \otimes \mathbb{1}_B)|a\rangle \otimes |b\rangle &= a|a\rangle \otimes |b\rangle \\ (\mathbb{1}_A \otimes B)|a\rangle \otimes |b\rangle &= |a\rangle \otimes b|b\rangle \\ (A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= (A|\phi\rangle) \otimes (B|\chi\rangle) \\ &= (A \otimes \mathbb{1}_B)(\mathbb{1}_A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \\ &= (A \otimes \mathbb{1}_B)[|\phi\rangle \otimes (B|\chi\rangle)]\end{aligned}$$

General form:

$$\begin{aligned}R &= \sum_j S_j^A \otimes T_j^B \\ |\psi\rangle &= \sum_{jk} c_{jk} |\phi_j\rangle \otimes |\chi_k\rangle \quad \phi \in \mathcal{H}_A, \chi \in \mathcal{H}_B\end{aligned}$$

General  $|\psi\rangle \neq |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$  “Entangled”

$\begin{array}{c} \mathcal{H}_A \\ \hline \mathcal{H}_B \end{array}$	$ \phi_1\rangle, \quad  \phi_2\rangle, \quad \dots$
$ \chi_1\rangle$	$ \phi_1\rangle \otimes  \chi_1\rangle \quad \dots$
$ \chi_2\rangle$	$\cdot$
$\cdot$	$\cdot$
$\cdot$	
$\cdot$	

**Bemerkungen:**

- (1) war der Rest der letzten Vorlesung über Tensorräume
- (2) Für einen Operator der Form  $O = A + B + C$  mit  $A|a\rangle = a|c\rangle \dots$  gilt:

$$O|a, b, c\rangle = (a + b + c)|a, b, c\rangle \quad (\text{II.60})$$

**Beispiel:**

Helium-Atom ohne e-e-Wechselwirkung

Anregung:

$$H_{He} = H_{Z=2}^{(1)} + H_{Z=2}^{(2)} = -\frac{1}{2n_1^2} - \frac{1}{2n_2^2}$$

Die  $H_{Z=2}$  Terme sind klassische Wasserstoffähnliche Atome.

Allgemeinster (Zustands-) Vektor im bipartitem Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$

$$|\psi\rangle = \sum_{jk} c_{jk} |\varphi_j\rangle \otimes |\chi_k\rangle$$

$|\varphi_j\rangle$  und  $|\chi_k\rangle$  sind beliebig und nicht notwendig Basisvektoren !

$$|\psi\rangle \neq |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad , \quad \forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A, |\chi\rangle \in \mathcal{H}_B$$

heißt **verschränkt** oder **nicht-separabel** | entangled or non-entangled.

Wichtiges Hilfsmittel zur Charakterisierung des Verschänkungsgehalts bipartiter Systeme:

**Schmidt-Zerlegung**  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  gibt es eine ONB  $\{|j_A\rangle\}, \{|j_B\rangle\}$  von  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$ , sowie Koeffizienten:

$$\lambda_j \in \mathbb{R}_0^+, \sum \lambda_j^2 = 1$$

**Schmidt-Zerlegung**

$$|\psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j_A\rangle \otimes |j_B\rangle \quad (\text{II.61})$$

Dies ist eine erhebliche Vereinfachung gegenüber II.49 und II.57

**Bisher:** Einbettung der Elemente der Faktorräume in den Tensorraum.

**Jetzt:** umgekehrte Richtung - lassen sich  $|\psi\rangle$  aus  $\mathcal{H}$  in eindeutiger Weise mit Zuständen der Faktorräume identifizieren ?

Sei  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , dann ist gemäß (II.9) der Projektor auf  $|\psi\rangle$  durch:

$$P_{|\psi\rangle} \stackrel{(II.9)}{=} |\psi\rangle\langle\psi| \stackrel{(II.61)}{=} \sum_{jj'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \otimes |j_B\rangle\langle j'_B| \quad (II.62)$$

Zunächst nehmen wir an,  $|\psi\rangle$  besitze nur einen nichtverschwindenden Schmidt-Koeffizienten, d.h.  $\lambda_j = \delta_{jk}$ , womit folgt:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = |k_A\rangle\langle k_A| \otimes |k_B\rangle\langle k_B| \quad (II.63)$$

Bilden wir die **partielle Spur** dieses Projektionsoperators über eine vollständige Basis von  $\mathcal{H}_B$ , so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{„trace“}}}{\text{tr}_B} |\psi\rangle\langle\psi| &= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{„Spur“}}}{\text{Sp}_B} |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_m {}_B\langle m|\psi\rangle\langle\psi|m\rangle_B \\ &= \sum_m {}_B\langle m| \left[ |k_A\rangle\langle k_A| \otimes |k_B\rangle\langle k_B| \right] |m\rangle_B \\ &\stackrel{(II.63)}{=} \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| {}_B\langle m|k_B\rangle\langle k_B|m\rangle_B \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \sum_m \langle k_B|m\rangle_B \langle m|k_B\rangle \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\sum_m {}_B\langle m|k_B\rangle\langle m|k_B\rangle}_{=1: \text{ Vollständigkeit !}} = |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\langle k_B|k_B\rangle}_{\stackrel{(II.61)}{=} 1} \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \end{aligned}$$

wobei  ${}_B\langle m|$  und  $|m\rangle_B$  ONB-Vektoren aus  $\mathcal{H}_B$  sind.

Es gilt also:

$$\text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| = |k_A\rangle\langle k_A| \quad (II.64)$$

Dies liefert also eine eindeutige Zuordnung zwischen  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  (mit der Voraussetzung  $\lambda_j = \delta_{jk}$  !!!) und  $|k_A\rangle \in \mathcal{H}_A$  (nach Aussparen der  $\mathcal{H}_B$ -Komponente von  $|\psi\rangle$ ).

Völlig analog gilt:

$$\text{tr}_A |\psi\rangle\langle\psi| = |k_B\rangle\langle k_B| \quad (II.65)$$

### Interpretation von (II.64, II.65)

Verzicht auf die in den Basiszuständen des Faktorraums, über den gespurt wird, kodierte Information bringt **keinen** Informationsverlust bzgl. des in den Basiszuständen des verbleibenden Faktorraums eingeschriebene Struktur.

Die Situation verändert sich grundlegend, wenn wir mehr als einen nichtverschwindenden Schmidt-Koeffizienten  $\lambda_j$  in (II.61) zulassen:

Mit (II.62) erhält man für die Spur über  $\mathcal{H}_B$ :

$$\begin{aligned} \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| &\stackrel{(II.62)}{=} \sum_m \sum_{jj'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \underbrace{{}_B\langle m|j_B\rangle}_{\delta_{mj}} \underbrace{\langle j'_B|m\rangle_B}_{\delta_{mj'}} \\ &= \sum_m \lambda_m^2 |m_a\rangle\langle m_a| =: \rho_A = \text{reduzierte Dichtematrix} \end{aligned} \quad (II.66)$$

mit  $|\psi\rangle = \text{Zustand(-s-Vektor)}$  und  $\rho = \text{Zustand}$ .

Dies ist ein diagonal Operator auf  $\mathcal{H}_A$ , mit Eigenwerten  $\lambda_m^2 < 1$ . Da aber jeder Projektor

$|\varphi\rangle\langle\varphi|$  auf einen beliebigen Zustand  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A$  Eigenwerte 0 und 1 hat, lässt sich  $\text{tr}_B|\psi\rangle\langle\psi|$  im allgemeinen **nicht** mit einem Zustandsvektor in  $\mathcal{H}_A$  identifizieren!

$$\begin{aligned} \text{tr}_B|\psi\rangle\langle\psi| &= \rho_A \\ \text{tr}_A|\psi\rangle\langle\psi| &= \rho_B \end{aligned} \quad (\text{II.67})$$

Dabei ist  $\rho$  der **reduzierte/r Dichtematrix -operator** oder **statistischer Operator**.

Partielle Spurbildung über  $\mathcal{H}_A$  oder  $\mathcal{H}_B$  führt i.a. (d.h. für beliebige Verteilung der Schmidt-Koeffizienten von  $|\psi\rangle$ ) auf operatorwertige Objekte der Form (II.66), die nur für separable  $|\psi\rangle$  projektorwertig sind.

Dichtematrizen haben folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \rho_A^\dagger &= \rho_A \\ \text{tr}_A \rho_A &\stackrel{\text{(II.61)}}{=} \stackrel{\text{(II.66)}}{=} 1 = \text{tr}_A \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| \\ \text{tr} \rho_A^2 &\leq 1 \\ \rho_A &\geq 0 \end{aligned} \quad (\text{II.68})$$

Zur letzten Eigenschaft gilt: d.h.  $\rho_A$  hat nichtneg. EW  $\rho_A$  positiver Operator.

Wegen  $\sum \lambda_m^2 = 1$  und  $\lambda_m \in \mathbb{R}_0^+$  gilt, dass  $\text{tr} \rho_A^2 = 1$  genau dann, wenn:

$$\rho_A = |\varphi\rangle\langle\varphi| \quad \text{mit} \quad |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A \quad (\text{II.69})$$

Gilt (II.69), so bezeichnet man  $\rho_A$  als „**reinen Zustand**“, der m.a.W. dadurch gekennzeichnet ist, dass er mit einem Zustands-Vektor identifizierbar ist. Andernfalls heißt  $\rho_A$  „**gemischter Zustand**“ ( $\Leftrightarrow \text{tr} \rho_A^2 < 1$ ).

Motivation der Begrifflichkeit durch Wahl einer bestimmten Darstellung (d.h. in vorgegebener Basis)

$$\begin{aligned} \rho_A = |\varphi\rangle\langle\varphi| &= \left( \sum_j c_j |j\rangle \right) \left( \sum_l c_l^* \langle l| \right) = \sum_{jl} c_j \cdot c_l^* |j\rangle\langle l| \\ &= \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* & c_1 c_3^* & \dots \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 & c_2 c_3^* & \dots \\ c_1^* c_3 & c_2^* c_3 & |c_3|^2 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.70})$$

Diagonalisierung führt (da  $\rho_A$  ein Projektor ist) auf:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

Dagegen wissen wir wegen (II.66), dass ein gemischter Zustand die Diagonalform:

$$\begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 & \dots \\ 0 & |c_2|^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{II.71})$$

hat, also **nicht** in die Form von (II.70) überführt werden kann (bei (II.71) mindestens 2 Diagonaleinträge  $\neq 0$ ).

Reminiszenz an Kapitel I.1 (Doppelspalt) und I.2 dort: Die Interferenzterme dort werden in (II.70) gerade durch die Nebendiagonalelemente bestimmt. Die relevante Information über die Interferenzfähigkeit des Systems ist den „**Kohärenzen**“

$$c_i c_j^* = |c_i| |c_j| e^{i(\varphi_i - \varphi_j)}$$

in der vorgegebenen Basis eingeschrieben.

★hier fehlt eine Grafik★

Die Diagonalelemente der Dichtematrix heißen auch „**Populationen**“ (Wkt. für sich klassisch ausschließende Alternativen). Das Abklingen (d. Ausdämpfen) der Nebendiagonalelemente/Kohärenzen in einem dynamischen Prozess heißt „**Dekohärenz**“.

Da man mit dem Verschwinden des Interferenzterms die Phänomenologie klassischer Teilchen am Doppelspalt gewinnt, vermittelt Dekohärenz der **quanten-klassischen Übergang**.

[Interessantes Paper zu Buckyballs auf ILIAS](#)

# Kapitel III

## Dynamik

**Bisher:** statische Struktur des Zustandsraums der Quantenmechanik.

**Jetzt:** Parametrisierung in der Zeit (zunächst aber **ohne** Begründung der „Richtung“ der Zeit (→ Ausblick: Dekohärenztheorie als ein aktueller Kandidat für den Ursprung des Zeitpfeils.)).

### III.1 Die Schrödinger-Gleichung

Forderungen an die zeitliche Entwicklung eines Zustandes  $|\psi\rangle$  : Stetigkeit, d.h.

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \equiv \text{Anfangszustand} \quad (\text{III.1})$$

wobei  $t > t_0$ .

Weiter werde der Zustand  $|\psi(t)\rangle$  durch Operation des **Zeitentwicklungsoperators**  $U(t, t_0)$  auf  $|\psi_0\rangle$  erzeugt, d.h.

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_0\rangle \quad (\text{III.2})$$

Im Sinne der Interpretation von  $|\psi\rangle$  also Wahrscheinlichkeitsamplitude für Messergebnisse fordern wir die Normerhaltung im Laufe der Zeit, was die Unitarität von  $U(t, t_0)$  impliziert (daher auch Sprechweise  $U \equiv$  "the unitary").

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (\text{III.3})$$

Dies garantiert:

$$\| |\psi(t)\rangle \| = 1 \quad \forall t \quad (\text{III.4})$$

Im Sinne einer kontinuierlichen und in einzelnen Zeitintervalle zerlegbaren Entwicklung fordern wir außerdem:

$$U(t, t_0) = U(t_1, t_2)U(t, t_0) \quad \forall t_2 > t_1 > t_0 \quad (\text{III.5})$$

Mit der Stetigkeitsbedingung (III.1) folgt für ein infinitesimales Zeitintervall  $dt$ :

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} \quad (\text{III.6})$$

Der Ansatz

$$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i\Omega dt \quad (\text{III.7})$$

mit  $\Omega = \Omega^\dagger$ , erfüllt die Forderungen aus (III.3), (III.5) und (III.6) - unter der Voraussetzung, dass Terme der Ordnung  $dt^2$  vernachlässigbar sind.