Rekapitulation

Energie-Op. $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Erwartungswert $\langle O \rangle = \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t)\, \hat{O}\, \psi(\vec{x},t)$

$= \int d^3k \; \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hat{O}\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)$

Hamilton-Fkt. $H = E_{kin} + V$ (Konservative Kräfte)

Poisson Klammer: $\{F, G\} = \sum_k \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} \right)$

$$\Rightarrow \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}$$

$\{q_i, q_j\} = 0$ (5.16a), da $\frac{\partial q_i}{\partial p_k} = 0 \quad \forall i,k$

$\{p_i, p_j\} = 0$ (5.16b), da $\frac{\partial p_i}{\partial q_k} = 0 \quad \forall i,k$

$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ (5.16c)

<u>Denn:</u> $\{q_i, p_j\} = \sum_k \left(\underbrace{\frac{\partial q_i}{\partial q_k}}_{\delta_{ik}} \underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial p_k}}_{\delta_{jk}} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right)$

6. Formale Grundlagen der QM

6.a Die Postulate der QM

Postulat 1

Jedes System von Teilchen, unter dem Einfluss von externen und internen Kräften, kann durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x}_i, t)$ beschrieben werden, die das <u>gesamte</u> Wissen über dieses System enthält. ψ ist in der Regel komplex.

Beachte: Externe Kräfte werden klassisch behandelt,
z.B. Potenzial ($\Rightarrow$ QFT)

Postulat 2

Zu jeder physikalischen Observablen q gehört ein Operator $\hat{q}$. Eine Messung von q ergibt einen Eigenwert q_n von $\hat{q}$, aus

$$\hat{q}\,\psi_n(\vec{x}, t) = q_n\,\psi_n(\vec{x}, t) \qquad (6.1)$$

Eine Messung impliziert eine Wechselwirkung zwischen "System" und "Beobachter" (oder Messapparat).
Falls $\psi = \psi_n$ vor der Messung: Messwert $= q_n$ mit Wahrscheinlichkeit 1. Falls $\psi \neq \psi_n \; \forall_n$: Ergebnis einer einzelnen Messung kann <u>nicht</u> mit Sicherheit vorher gesagt werden. Unmittelbar <u>nach</u> der Messung ist $\psi = \psi_n$

2. Eigenschaft $\Rightarrow$ Reproduzierbarkeit Unmittelbar folgende 2. Messung ergibt wiederum q_n

zunächst: Diskretes Spektrum q_n

> **Definition 1:** Ein Operator $\hat{q}$ ist hermitisch, falls
> $$\int \Psi_a^*(\vec{x},t)\,\hat{q}\,\Psi_b(\vec{x},t)\,d^3x = \int \left(\hat{q}\,\Psi_a(\vec{x},t)\right)^* \Psi_b(\vec{x},t)\,d^3x \qquad (6.2)$$
> $\forall$ normierbaren Ψ_a, Ψ_b, wobei das Integral über den ganzen Raum zu nehmen ist.

Beispiele

*) Jede Koordinate x_i ist hermitisch, da (im Ortsraum) die Anwendung von $\hat{x}_j :=$ Multipl. mit $x_j \in \mathbb{R}$

*) Der Impuls Operator (4.1), z.B. $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ ist hermitisch.

$$\int \Psi_a^*(\vec{x},t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_b(x,y,z,t)\,dx\,dy\,dz$$

$$= -i\hbar\left[\underbrace{\int \Psi_a^*(\vec{x},t)\Psi_b(\vec{x},t)\,dy\,dz\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty}}_{=0\ (\text{Normierbarkeit})} - \int\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_a(\vec{x},t)\right)^*\Psi_b(\vec{x},t)\,d^3x\right]$$

$$= \int\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi_a(\vec{x},t)\right)^*\Psi_b(\vec{x},t)\,d^3x \qquad \text{q.e.d}$$

Beachte: Faktor i ist notwendig!

*) $\hat{p}_x^2$ ist hermitisch

$$\int \Psi_a^*(\vec{x},t)\,\hat{p}_x^2\,\Psi_b(\vec{x},t)\,d^3x = \int \Psi_a^*\,\hat{p}_x\underbrace{(\hat{p}_x\Psi_b)}_{\Psi_{b'}}\,d^3x$$

$$= \int(\hat{p}_x\Psi_a)^*\,\hat{p}_x\Psi_b\,d^3x = \int(\hat{p}_x^2\Psi_a)^*\Psi_b\,d^3x \qquad \text{q.e.d}$$

Induktion: $\hat{P}_x^n$, $n>2$ Analog: $\hat{P}_y^n$, $\hat{P}_t^n$

*) Offensichtlich ist jede Linearkombination von hermitischen Operatoren selber hermitisch, wenn alle Koeffizienten $\in \mathbb{R}$ sind.

Satz 1: Alle Eigenwerte eines hermitischen Operators sind reell

Beweis: $\hat{q}\,\psi_n = q_n \psi_n$ Eigenwert-Gl.

$$\Rightarrow \int \psi_n^* \hat{q}\, \psi_n \, d^3x = \int \psi_n^* q_n \psi_n \, d^3x = q_n \int \psi_n^* \psi_n \, d^3x$$

$$\| (6.2) \qquad\qquad\qquad\qquad \|$$

$$\int (\hat{q}\,\psi_n)^* \psi_n \, d^3x = \int (q_n \psi_n)^* \psi_n \, d^3x = q_n^* \int \psi_n^* \psi_n \, d^3x$$

$$\Rightarrow q_n = q_n^*$$

q.e.d

Postulat 3

Zu jeder physikalischen Observablen gehört ein hermitischer Operator

Messungen geben reelle Messwerte!

Definition 2.

Zwei Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{x}), \psi_b(\vec{x})$ sind orthogonal, falls

$$\int \psi_a^*(\vec{x})\, \psi_b(\vec{x})\, d^3x = 0 \qquad (6.5)$$

bei Integration über den ganzen Raum

Definition 3:

Die Mitglieder einer Menge von Funktionen $\{\psi_i\}$ sind linear unabhängig, falls die lineare Gleichung

$$\sum_j c_j \psi_j(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \qquad (6.6), \quad c_j \in \mathbb{C} \text{ konst.}$$

als einzige Lösung $c_j = 0 \; \forall j$, zulässt. Andernfalls sind die ψ_i linear abhängig.

Beispiele

*) $\sin(2\pi j x)$, $\cos(2\pi j x)$, $x \in [-1,1]$

*) Hermite-Polynome H_j, $x \in \mathbb{R}$

Definition 4

Ein Eigenwert q eines Operators $\hat{q}$ heißt m-fach entartet, wenn es m linear unabhängige Eigenfunktionen zu diesem Eigenwert gibt.

Satz 2

Zwei Eigenfunktionen eines hermitischen Operators $\hat{q}$ sind orthogonal, falls die zugehörigen Eigenwerte nicht gleich sind.

Beweis:

$$\int \psi_n^* \hat{q}\, \psi_m \, d^3x = q_m \int \psi_n^* \psi_m \, d^3x$$

$$\| (6.2) \qquad\qquad\qquad\qquad \|$$

$$\int (\hat{q}\, \psi_n^*)^* \psi_m \, d^3x = q_n^* \int \psi_n^* \psi_m \, d^3x \underset{\text{Satz 1}}{=} q_n \int \psi_n^* \psi_m \, d^3x$$

$$\Rightarrow (q_n - q_m) \int \psi_n^* \psi_m \, d^3x = 0 \underset{(6.5)}{\Rightarrow} \qquad \text{q.e.d.}$$

> **Satz 3**
>
> Falls ein Eigenwert q von $\hat{q}$ entartet ist, so ist jede Linearkombination von Eigenfunktionen zum Eigenwert q ebenfalls Eigenfunktion zum Eigenwert q

Beweis

$$\hat{q}\left(\sum_j c_j \psi_j\right) = \sum_j c_j \hat{q}\, \psi_j = \sum_j c_j\, q\, \psi_j = q\left(\sum_j c_j \psi_j\right) \qquad \text{q.e.d}$$

> **Definition 5**
>
> Eine Menge linearer unabhängiger Eigenfunktionen zum festen Eigenwert q ist <u>vollständig</u>, wenn man keine weitere Eigenfunktion mit Eigenwert q zu dieser Menge hinzufügen kann, ohne die Eigenschaft der linearen Unabhängigkeit zu zerstören

Satz 4

Wenn $\{\psi_i\}$ eine vollständige Menge von Eigenfunktionen zum m-fach entarteten Eigenwert q ist, so kann <u>jede</u> Eigenfunktion von $\hat{q}$ zum Eigenwert q als Linearkombination der ψ_j geschrieben werden

Beweis

Betrachte $a\,\psi(\vec{x}) - \sum_{j=1}^{m} c_j \psi_j(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x}$ (6.7)

mit $\hat{q}\psi = q\psi$, $\hat{q}\psi_j = q\psi_j$

Für $a=0$: Einzige Lösung $c_j = 0 \ \forall i$ (Def. 3)

(6.7) <u>muss</u> Lösung mit $a \neq 0 \Rightarrow c_j \neq 0$ haben, sonst wäre $\{\psi\} \cup \{\psi_j\}$ auch eine Menge linear unabhängiger Funktionen $\underset{\text{Def. 5}}{\Rightarrow}$ $\{\psi_j\}$ nicht vollständig

$a \neq 0 \underset{(6.7)}{\Rightarrow} \psi = \frac{1}{a}\sum_{j=1}^{m} c_j \psi_j$ q.e.d.

Satz 5

Wenn die $\{\psi_j\}$ eine vollständige Menge von Eigenfunktionen bilden, so kann man Linearkombinationen u_i der ψ_i bilden, sodass die $\{u_i\}$ eine vollständige Menge linear unabhängiger <u>orthogonaler</u> Eigenfunktionen ist.

Konstruktiver Beweis

Orthogonalisierungsprozedur nach Schmidt

Wähle $u_1 = \psi_1$

Sei $\int (u_1)^2 d^3x = c_{11}$, $\int u_1^* \psi_2 d^3x = c_{12}$ (6.8)

Definiere $u_2 = \frac{c_{12}}{c_{11}} u_1 - \psi_2$ (6.9)

$$\Rightarrow \int u_1^* u_2 d^3x = \int u_1^* \left(\frac{c_{12}}{c_{11}} u_1 - \psi_2\right) d^3x$$

$$\underset{(6.8)}{=} \frac{c_{12}}{c_{11}} c_{11} - c_{12} = 0$$: u_1, u_2 sind orthogonal!

Induktionsschritt $n \to n+1$:

$$c_{kk} = \int |u_1|^2 d^3x \quad , \quad c_{k,n+1} = \int u_k^* \psi_{n+1} d^3x \quad , k = 1, \ldots, n$$

$$u_{n+1} = \sum_{k=1}^{n} \frac{c_{k,n+1}}{c_{kk}} u_k - \psi_{n+1} \qquad (6.10)$$

$$\Rightarrow \int u_l^* u_{n+1} d^3x = \sum_{k=1}^{n} \frac{c_{k,n+1}}{c_{kk}} \underbrace{\int u_l^* \psi_{n+1} d^3x}_{\delta_{lk} c_{kk}} - \int u_l^* \psi_{n+1} d^3x$$

$$= c_{l,n+1} - c_{l,n+1} = 0 \quad \forall l = 1, \ldots, n$$