NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

08. Mai 2010

Andreas Windisch

WARNUNG: Dies ist eine NOTFALLKARTE die idealerweise nicht benötigt wird. Sollte dennoch ein Notfall in Form eines Blackouts (momentaner Totalverlust der Orientierung im Hilbertraum) eintreten, dann ist diese Karte zu konsultieren.

Verhalten im Notfall

1. Ruhe bewahren!
2. Problem erkennen: Was ist das Problem das ich lösen will?
3. Objekte identifizieren: Was brauche ich für die Lösung?
4. Problem lösen

*

A Formalisierung

Die Beschreibung der Theorie erfolgt in einem Hilbertraum $\mathscr{H}$. Mit dem Hilbertraum können wir das Problem und dessen Lösungen beschreiben und untersuchen.

*

B Basis, Zustände, Operatoren

Der Hilbertraum $\mathscr{H}$ besitzt eine Orthonormalbasis $\{|\phi\rangle\}$. Zusammen mit dem Skalarprodukt $\langle a|b\rangle$ können wir die Orthonormalität formulieren:

$$\langle \phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$$

mit δ_{nm} dem Kroneckerdelta

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

Folgenden Objekten werden wir begegnen:

$$\begin{array}{rcl} |\psi\rangle \in \mathscr{H} & \ldots & \text{Ket, (Vektor)} \\ \langle\phi| \in \mathscr{H}^* & \ldots & \text{Bra} \\ \langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C} & \ldots & \text{Skalarprodukt, (Zahl)} \\ \hat{A} & \ldots & \text{linearer Operator} \\ |A\rangle\langle B| & \ldots & \text{linearer Operator} \\ |\phi\rangle\langle\phi| & \ldots & \text{Projektor,} \end{array}$$

mit $\mathscr{H}^*$ dem Dualraum zum Hilbertraum $\mathscr{H}$. Das Ket $|\psi\rangle$ beschreibt einen Zustand des Systems. Um den Zustand zu messen benötigen wir **Observable**, die durch **hermite'sche Operatoren** auf dem Hilbertraum repräsentiert werden.

$$\begin{array}{rcl} \hat{A} = \hat{A}^\dagger & \ldots & \sigma(\hat{A}) \in \mathbb{R} \text{ Hermite'sch} \\ \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger & \ldots & \text{Unitär} \\ (\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{1}), & & \end{array}$$

mit $\sigma(\hat{A})$ dem Spektrum des Operators A.
Operatoren wirken auf Zustände und verändern diese:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle,$$

bzw.

$$|\phi\rangle \underbrace{\langle\phi|\psi\rangle}_{a\in\mathbb{C}} = a|\phi\rangle.$$

Im letzteren Falle wurde mittels des Projektors $|\phi\rangle\langle\phi|$ die Komponente des Zustandes $|\psi\rangle$ in Richtung von $|\phi\rangle$ herausprojeziert. Ein **Projektionsoperator** (oder kurz **Projektor**) ist ein Operator der zwei Eigenschaften aufweist:

1. $\hat{P}^2 = \hat{P}$ idempotent: 'Zweimaliges Projezieren ist so gut wie einmaliges'.
2. $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$: Projektoren sind hermite'sch.

*

C Funktionen von Operatoren

Sei $F(\hat{A})$ Funktion eines Operators $\hat{A}$. Ist $\hat{A}$ ein beschränkter, linearer Operator, so können wir $F(\hat{A})$ in eine Taylorreihe von $\hat{A}$ entwickeln:

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n,$$

mit a_n Entwicklungskoeffizienten. Die **hermite'sche Konjugation des Operators** wird wie folgt gebildet:

$$[F(\hat{A})]^\dagger = F^*(\hat{A}^\dagger),$$

dh.

$$F^*(\hat{A}^\dagger) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* (\hat{A}^\dagger)^n.$$

*

D Kommutator und Antikommutator

Der **Kommutator** zwischen zwei Operatoren (Observablen) ist definiert als:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Der **Antikommutator** zwischen zwei Operatoren (Observablen) ist definiert als:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Wenn zwei Operatoren (Observablen) **kommutieren**, so sind sie **simultan diagonalisierbar**. Solche Observablen können gleichzeitig beliebig genau gemessen werden (**Unschärferelation**).

*

E Spektraldarstellung

Die **Spektraldarstellung** eines Operators ist

$$A = \sum_i |a_i\rangle a_i \langle a_i|.$$

In dieser Form ist die Matrixdarstellung des Operators **diagonal**, und seine Eigenwerte können auf der Hauptdiagonale abgelesen werden.

*

F Vollständigkeit

Die Vollständigkeitsrelation der Basis ist ein mächtiges Werkzeug:
Für diskrete Basissysteme finden wir

$$\mathbb{1} = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|,$$

in kontinuierlichen Basissystemen sieht die Vollständigkeitsrelation so

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dj |\xi_j\rangle\langle\xi_j|$$

aus.

- BITTE WENDEN! -

NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

08. Mai 2010

Andreas Windisch

WARNUNG: Dies ist eine NOTFALLKARTE die idealerweise nicht benötigt wird. Sollte dennoch ein Notfall in Form eines Blackouts (momentaner Totalverlust der Orientierung im Hilbertraum) eintreten, dann ist diese Karte zu konsultieren.

G Matrixdarstellung von Kets & Op.

Mit der in Punkt F gezeigten Darstellung der $\mathbb{1}$ hat man ein mächtiges Werkzeug gewonnen. Es eignet sich etwa um die **Matrixdarstellung eines Kets** zu erhalten:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i|\psi\rangle}_{b_i \in \mathbb{C}} = \sum_i b_i |a_i\rangle.$$

Damit haben wir alle Komponenten des Zustandes $|\psi\rangle$ bezüglich der gewählten, vollständigen Basis, die wir verwendet haben um die 'Eins einzuschieben'. Es handelt sich tatsächlich um eine **Matrixdarstellung**, da wir nun schreiben können:

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \langle a_3|\psi\rangle \\ \langle a_4|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle a_n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Ganz analog können wir für die **Matrixdarstellung eines Operators** vorgehen:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_i \sum_j |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle}_{\text{Matrixelement}} \langle a_j| \\ &= \sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle\langle a_j|. \end{aligned}$$

Die **Matrixelemente** identifizieren wir als

$$A_{ij} = \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle.$$

Dies führt in der gewählten Basis zu einer quadratischen Matrix A:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Bsp.:
Der Operator $\hat{A} = (\alpha|1\rangle\langle 2| + \beta|2\rangle\langle 1| + \gamma|1\rangle\langle 1| + \delta|2\rangle\langle 2|)$ sieht als (2×2) Matrix geschrieben so aus:

$$A = \begin{pmatrix} \gamma & \alpha \\ \beta & \delta \end{pmatrix}.$$

*

H Darstellungswechsel

Oft ist es von Vorteil mittels eines **Darstellungswechsels** in eine geeignetere Basis überzugehen. Ein solcher Übergang wird durch eine **unitäre Transformation** vollzogen. Wieder wird uns hier das 'Tool' der Vollständigkeit nützliche Dienste leisten.
Angenommen wir haben zwei vollständige, orthonormale Basissysteme $\{|\phi_n\rangle\}$ und $\{|\phi'_n\rangle\}$. Jedes Basis-Ket $|\phi_n\rangle$ der alten Basis kann in Termen der Kets der neuen Basis geschrieben werden:

$$|\phi_n\rangle = \mathbb{1}|\phi_n\rangle = \sum_m |\phi'_m\rangle\langle\phi'_m|\phi_n\rangle = \sum_m U_{mn}|\phi'_m\rangle.$$

Dabei ist

$$U_{mn} = \langle\phi'_m|\phi_n\rangle,$$

und die von der alten Basis $\{|\phi_n\rangle\}$ in die neue Basis $\{|\phi'_n\rangle\}$ vermittelnde Matrix ist von der Form

$$U = \begin{pmatrix} \langle\phi'_1|\phi_1\rangle & \langle\phi'_1|\phi_2\rangle & \langle\phi'_1|\phi_3\rangle \\ \langle\phi'_2|\phi_1\rangle & \langle\phi'_2|\phi_2\rangle & \langle\phi'_2|\phi_3\rangle \\ \langle\phi'_3|\phi_1\rangle & \langle\phi'_3|\phi_2\rangle & \langle\phi'_3|\phi_3\rangle \end{pmatrix}.$$

Wir wollen nun die **Komponenten** $\langle\phi'_n|\xi\rangle$ **des Zustandes** $|\xi\rangle$ in der neuen Basis $\{|\phi'_n\rangle\}$ **in Termen der Komponenten** $\langle\phi_n|\xi\rangle$ **der alten Basis** $\{|\phi_n\rangle\}$ ausdrücken.

$$\langle\phi'_m|\xi\rangle = \langle\phi'_m|\mathbb{1}|\xi\rangle = \sum_n \langle\phi'_m|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\xi\rangle = \sum_n U_{mn}\langle\phi_n|\xi\rangle.$$

Die Vorschrift für die **Transformation des Operators** $\hat{A}$ erhalten wir durch zweimaliges Einschieben der Eins:

$$A'_{mn} = \sum_j \sum_l \langle\phi'_m|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\hat{A}|\phi_l\rangle\langle\phi_l|\phi'_n\rangle = \sum_{j,l} U_{mj} A_{jl} U^*_{nl}.$$

Damit haben wir:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{neu} &= \hat{U}\hat{A}_{alt}\hat{U}^\dagger \\ \hat{A}_{alt} &= \hat{U}^\dagger\hat{A}_{neu}\hat{U}. \end{aligned}$$

*

I Eigenwertproblem

Das **Eigenwertproblem** für einen Operator liefert uns dessen Spektrum (Eigenwerte) und Eigenzustände. In seiner Eigenbasis ist der Operator diagonal (siehe **Spektraldarstellung**). Die Eigenwerte hermite'scher Operatoren sind reell und werden als Messergebnis der entsprechenden Observable interpretiert. Das Vorgehen zum Lösen des Eigenwertproblemes ist aus der linearen Algebra bekannt:

1. Nullsetzen des charakteristischen Polynomes führt zur Säkulargleichung: $\det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$.

2. Die Nullstellen liefern die Eigenwerte: $\lambda_1, \lambda_2, \dots$

3. Berechnung des dem jeweiligen Eigenwert zugeordneten Eigenvektors:
   Bsp.: 2×2 Problem, betrachte Eigenwert λ_i:

$$\begin{pmatrix} a_{11} - \lambda_i & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1^{(i)} \\ \alpha_2^{(i)} \end{pmatrix} = 0.$$

Die Eigenwertgleichung in der Ket-Notation sieht so aus:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle.$$

*

J Erwartungswert eines Operators

Der **Erwartungswert** $\langle\hat{A}\rangle$ von $\hat{A}$ bezüglich eines Zustandes $|\psi\rangle$ ist definiert durch:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Der Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ ist das mittlere Ergebnis der Messung $\hat{A}$ auf dem Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}\sum_{m,n}\langle\psi|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Dabei haben wir zwei vollständige Sätze von Eigenvektoren von $\hat{A}$ eingeschoben. Mit der **Wahrscheinlichkeit** P_n den Wert a_n nach Messung der Observablen $\hat{A}$ zu finden ist dann

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n a_n P_n.$$

*

K Unschärferelation

Das Produkt der Unschärfen zweier Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ können wir mit der **Unschärferelation** angeben:

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|^2.$$

- BITTE WENDEN! -