

# Kapitel 1

## Zur Struktur der Quantenmechanik

### 1.1 Der quantenmechanische Hilbert-Raum

Elementare Teilchen können nicht in Bestandteile zerlegt werden. Physikalisch können Teilchen nur wirksam werden, wenn sie in verschiedenen Zuständen vorliegen können. Die Gesamtmenge möglicher Zustände bildet einen Raum.

#### Linearer Zustandsraum

Die quantenmechanischen Zustände (z.B.  $\psi(\vec{x}, t)$  für ein Teilchen) bilden einen *linearen Raum*.

- Sind  $\psi_1$  und  $\psi_2$  physikalisch realisierbare Zustände, so ist es auch

$$\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

(*Superpositionsprinzip*).

- Das Superpositionsprinzip beschreibt die Überlagerung von Zuständen eines und desselben Teilchens (also mit sich selbst), wie z.B. beim Doppelspaltexperiment.

#### Skalarprodukt

Im Raum der Zustände ist durch

$$(\psi_2, \psi_1) = \int dx^3 \psi_2^*(\vec{x}, t) \psi_1(\vec{x}, t), \quad (\psi, \psi) > 0,$$

ein *Skalarprodukt* definiert. Es ist

- antilinear im ersten Argument  $(\lambda \psi_1, \psi_2) = \lambda^* (\psi_1, \psi_2)$ ,
- linear im zweiten Argument,  $(\psi_1, \lambda \psi_2) = \lambda (\psi_1, \psi_2)$
- hermitisch  $(\psi_2, \psi_1) = (\psi_1, \psi_2)^*$
- positiv definit  $(\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$ .

**Norm**

Mathematisch wird der Raum der Zustände durch das Skalarprodukt  $(\psi_1, \psi_2)$  zu einem *normierten Raum*, mit der Definition der

- Norm:  $\|\psi\| \equiv +\sqrt{(\psi, \psi)}$ .

Meistens schreiben wir für die Norm  $\|\psi\|$  von  $\psi$  auch einfach  $|\psi|$ .

**Konvergenz von Folgen**

Einen *euklidischen Raum* kann man mittels der Norm die *Konvergenz* einer Folge  $\{\psi_n, n = 1, \dots\}$  definieren:

$$\{\psi_n, n = 1, \dots\} \quad \text{konvergent gegen } \psi, \text{ falls} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi\| = 0.$$

**Cauchy Folgen**

Die Folge  $\{\psi_n, n = 1, \dots\}$  heißt *Cauchy-Folge*, falls für beliebiges  $\varepsilon > 0$  ein  $N(\varepsilon)$  existiert, so daß

$$\|\psi_{n_1} - \psi_{n_2}\| < \varepsilon, \quad \text{für } n_1, n_2 > N(\varepsilon).$$

**Vollständige Räume**

Falls zu jeder Cauchy-Folge im Raum ein Grenzelement gehört (wie im  $\mathcal{R}^n$ ), so heißt der Raum *vollständig*. Der Raum der stetigen Funktionen ist nicht vollständig. Jedoch kann man zeigen (Riesz-Fischer), daß der Raum der quadratintegrablen Funktionen vollständig ist.

**Hilbert-Raum**

Ein Vektorraum mit Skalarprodukt, der vollständig ist, heißt *Hilbert-Raum*  $\mathcal{H}$ .

**Dichte Untermengen**

Eine Untermenge des Hilbert-Raumes heißt *dicht* in  $\mathcal{H}$ , falls die Menge aller Grenzelemente  $\mathcal{H}$  selbst ist.

**Separable Hilbert-Räume**

Gibt es abzählbare Untermengen, die dicht sind, so heißt  $\mathcal{H}$  *separabel*. Der quantenmechanische Hilbert-Raum ist vollständig und separabel.

- Wären Hilbert-Räume nicht vollständig, dann würden Cauchy-Folgen zu nicht-physikalischen Zuständen konvergieren.
- Wären Hilbert-Räume nicht separabel, dann gäbe es keine abzählbare Basis.

### 1.1.1 Operatoren

Ein Operator  $\mathbf{O}$  ist eine *lineare Abbildung*

$$\mathbf{O} : \quad \Psi \rightarrow \mathbf{O}\Psi, \quad (1.1)$$

die für alle Zustände  $\Psi$  im Hilbert-Raum definiert ist. Matrizen sind Operatoren auf Vektorräume.

#### Selbstadjungierte Operatoren

Ein *selbstadjungierter Operator*

$$\mathbf{a}^\dagger = \mathbf{a}, \quad (\mathbf{a}^\dagger \psi_1, \psi_2) = (\psi_1, \mathbf{a} \psi_2), \quad \forall \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H},$$

hat reelle Eigenwerte. selbstadjungierte Operatoren entsprechen hermiteschen Matrizen.

#### Postulat

Den physikalischen Größen wie Ort, Impuls, Drehimpuls, Energie etc. entsprechen selbstadjungierte Operatoren im Hilbert-Raum. Dabei bildet die Menge der Eigenwerte der Operatoren das *Spektrum* der möglichen Messwerte.

#### Diskrete Spektren

Bei endlich-dimensionalen Matrizen (wie z.B. beim Drehimpuls) ist das Spektrum *diskret*, d.h. es gibt nur endlich viele verschiedene Eigenwerte und Eigenvektoren.

#### Kontinuierliche Spektren

Bei Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum sind die Eigenfunktionen nicht quadratintegrierbar und gehören damit im eigentlichen Sinne nicht zum Hilbertraum.

Wie z.B. die des Impulsoperators,

$$\mathbf{P}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx_j}, \quad j = 1, 2, 3, \quad e_p(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar^3}}.$$

Mathematisch lässt sich das Problem der nicht-Integrierbarkeit durch eine Grenzwert-Betrachtung lösen. Man betrachtet erst das physikalische System in einem endlichen Volumen  $V$ , mit integrierbaren Eigenfunktionen

$$e_p(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{\sqrt{V}},$$

und lässt dann das Volumen  $V \rightarrow \infty$  nach unendlich gehen. Diese Vorgehensweise wird in der Festkörperphysik eingehend diskutiert.

#### Nicht-entartete Eigenfunktionen

In der Quantenmechanik sucht man i.A. eine *orthogonale Basis* für den Hilbertraum welche der physikalischen Problemstellung angepasst ist, also den relevanten Observablen.

Wir betrachten als erstes einen selbstadjungierter Operator  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A} u_j = a_j u_j, \quad a_j \in \mathcal{R}$$

aus. Sind die Eigenwerte nicht entartet, d.h. gehört zu jedem  $a_j$ ,  $j_1 = 1, 2, \dots$ , genau ein eindimensionaler Eigenvektorraum mit Eigenfunktion  $u_j$ , so ist man fertig: Nicht-entartete Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators bilden eine orthogonale Basis.

### Entartete Eigenfunktionen

Im allgemeinen werden die Eigenwerte eines Operators  $\mathbf{A}$  jedoch entartet sein. Dann sucht man einen zweiten, physikalisch relevanten, Operator  $\mathbf{B}$ , der mit  $\mathbf{A}$  kommutiert,

$$\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A} .$$

Man kann dann die Eigenvektoren von  $\mathbf{B}$  so wählen, daß diese gleichzeitig Eigenvektoren von  $\mathbf{A}$  sind,

$$\mathbf{B}u_{j,l} = b_{j,l}u_{j,l}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}u_{j,l} = a_j u_{j,l}, \quad \forall l .$$

Im allgemeinen werden zu einem Eigenwert  $a_j$  von  $\mathbf{A}$  verschiedene  $b_{j,l}$  gehören, mit Eigenvektoren  $u_{j,l}$ , d.h. die ursprüngliche Entartung wird reduziert.

### Vollständiger Satz von kommutierenden Observablen

Man setzt das Verfahren so lang fort, bis man einen Satz  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots)$  von selbstadjungierten Operatoren mit folgenden Eigenschaften hat:

- Je zwei der selbstadjungierten Operatoren kommutieren miteinander.
- Alle diese selbstadjungierten Operatoren haben gemeinsamen Eigenvektoren  $u_{j,l,\dots}$ .
- Jeder Eigenvektor  $u_{j,l,k,\dots}$  ist eindeutig durch den Satz  $(a_j, b_{j,l}, c_{j,l,k}, \dots)$  von Eigenwerten bestimmt.
- Verschiedene  $u_{j,l,\dots}$  sind zueinander orthogonal und bilden ein *vollständiges System*, d.h. jedes  $\psi \in \mathcal{H}$  läßt sich nach den  $u_\alpha$  entwickeln:

$$\psi = \sum_{\alpha} c_{\alpha} u_{\alpha}, \quad c_{\alpha} = (u_{\alpha}, \psi), \quad \alpha = (j, l, \dots),$$

wobei  $\alpha$  ein Multi-Index ist.

Man nennt die  $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots\}$  einen *vollständigen Satz von kommutierenden Observablen*. Für das Wasserstoff-Atom ist

$$\mathbf{A} = \mathbf{H}, \quad \mathbf{C} = \vec{\mathbf{L}}^2, \quad \mathbf{D} = \mathbf{L}_3, \quad \mathbf{E} = \mathbf{S}_3$$

ein vollständigen Satz kommutierender Variablen.

### Unterräume

Sei  $M \subset \mathcal{H}$  ein Unterraum des Hilbertraumes  $\mathcal{H}$  und  $M_{\perp}$  das orthogonale Komplement von  $M$ ,

$$(\psi_M, \psi_{M_{\perp}}) = 0, \quad \forall \psi_M \in M, \quad \forall \psi_{M_{\perp}} \in M_{\perp} .$$

Wie  $M$  ist auch  $M_{\perp}$  ein Unterraum von  $\mathcal{H}$ , d.h. ein separabler Hilbertraum, d.h. abgeschlossen und vollständig. Jeder Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$  läßt sich eindeutig in zwei Komponenten  $\psi_M$  und  $\psi_{M_{\perp}}$  zerlegen,

$$\psi = \psi_M + \psi_{M_{\perp}}, \quad \psi_M \in M, \quad \psi_{M_{\perp}} \in M_{\perp},$$

was entsprechende Projektionsoperatoren definiert.

### Projektionsoperatoren

Der *Projektionsoperator*  $\mathbf{P}_M$  auf den Unterraum  $M$  wird via

$$\mathbf{P}_M \psi = \psi_M \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$$

definiert. Somit gilt

$$\mathbf{P}^2 \psi = \mathbf{P} \mathbf{P} \psi = \mathbf{P} \psi_M = \psi_M, \quad \mathbf{P} \psi_{M^\perp} = 0.$$

Umgekehrt projiziert  $\mathbf{1} - \mathbf{P}_M$  auf  $M^\perp$ . Projektionsoperatoren  $\mathbf{P}$  haben folgende Eigenschaften:

- Idempotent  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$
- Selbstadjungiert  $\mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P}$   
Seien  $\psi_1, \psi_2$  beliebig, dann gilt

$$(\psi_2, \mathbf{P}_M \psi_1) = (\psi_{2M} + \psi_{2M^\perp}, \psi_{1M}) = (\psi_{2M}, \psi_{1M}) = (\mathbf{P}_M \psi_2, \psi_1).$$

- Die Eigenwerte sind 1 und 0  
Sei  $\mathbf{P} \psi = \lambda \psi$ , dann ist

$$\mathbf{P}^2 \psi = \lambda^2 \psi = \mathbf{P} \psi = \lambda \psi, \quad \lambda^2 = \lambda, \quad \lambda = 1, 0,$$

da  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ . Die Eigenvektoren zu  $\lambda = 1$  sind die Elemente von  $M$ , die zu  $\lambda = 0$  die in  $M^\perp$ .

- Kommutationsregeln  
Zwei Projektionsoperatoren auf die Unterräume  $M_1$  und  $M_2$ ,  $\mathbf{P}_1$  und  $\mathbf{P}_2$ , kommutieren i.A. nicht. Falls  $M_1$  orthogonal zu  $M_2$  ist, dann hat man jedoch

$$\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 = 0.$$

### Endliche Vektorräume

Als Beispiel betrachten wir mit  $\mathcal{H}$  einen  $n$ -dimensionalen Vektorraum.  $A$  sei eine hermitesche Matrix mit nicht entarteten Eigenwerten  $a_j$  und Eigenvektoren

$$u_j = \begin{pmatrix} c_1(j) \\ \vdots \\ c_n(j) \end{pmatrix}, \quad c_i(j) : \text{komplex.}$$

Das Skalarprodukt ist

$$u_j^\dagger u_k = \left( c_1^*(j), \dots, c_n^*(j) \right) \begin{pmatrix} c_1(k) \\ \vdots \\ c_n(k) \end{pmatrix} = \sum_i c_i^*(j) c_i(k) = \delta_{jk}.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_j = u_j u_j^+ &= \begin{pmatrix} c_1(j) \\ \vdots \\ c_n(j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^*(j), \dots, c_n^*(j) \end{pmatrix} \\
 \text{(keine Summation über } j) & \\
 &\equiv \begin{pmatrix} c_1(j)c_1^*(j) & \cdots & c_1(j)c_n^*(j) \\ \vdots & & \vdots \\ c_n(j)c_1^*(j) & \cdots & c_n(j)c_n^*(j) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

da

$$\mathbf{P}_j u_k = (u_j u_j^+) u_k = u_j (u_j^+ u_k) = \delta_{jk} u_j.$$

Ferner

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_j \mathbf{P}_k &= u_j u_j^+ \cdot u_k u_k^+ = u_k \delta_{jk} u_k^+ = \delta_{jk} u_j u_j^+ \\
 &= \delta_{jk} \mathbf{P}_j.
 \end{aligned}$$

Ist  $a_j$  entartet, mit zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren  $u_{j,s}$ ,  $s = 1, \dots, m_j$ , dann lautet der Projektionsoperator auf den Eigenvektorraum

$$\mathbf{P}_j = \sum_{s=1}^{m_j} u_{j,s} \cdot u_{j,s}^+.$$

### Spektraldarstellung

Es sei  $\mathbf{A}$  ein selbstadjungierter Operator mit den Eigenwerten  $a_j$  – diese können entartet sein – und zugehörigen Eigenvektoren  $u_j$ , die einen Unterraum  $M_j$  aufspannen.

Es seien  $\mathbf{P}_j$  die Projektionsoperatoren auf die Unterräume  $M_j$  mit

$$\mathbf{P}_j \mathbf{P}_k = \mathbf{P}_k \mathbf{P}_j = \delta_{jk} \mathbf{P}_j; \quad \sum \mathbf{P}_j = \mathbf{1}.$$

Man nennt dann

$$\mathbf{A} = \sum_j a_j \mathbf{P}_j \quad \mathbf{A} u_j = a_j u_j$$

die *Spektraldarstellung* von  $\mathbf{A}$ .

### Operatorfunktionen

In der Spektraldarstellung ist ein Operator diagonal und man kann eine Funktion eines Operators  $\mathbf{A}$  durch

$$f(\mathbf{A}) = \sum_j f(a_j) \mathbf{P}_j$$

definieren.

### 1.1.2 Die Dirac'sche Notation

Die Spektraldarstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{A}u_j &= a_j u_j & u_j^+ u_k &= \delta_{jk} & u_j u_j^+ &= \mathbf{P}_j \\ \mathbf{A} &= \sum a_j \mathbf{P}_j & \sum \mathbf{P}_j &= \mathbf{1}, \end{aligned}$$

gilt für alle selbstadjungierten Operatoren, auch für solche mit kontinuierlichem Spektrum.

Dirac hat in diesem Zusammenhang eine *formale Schreibweise* entwickelt, die diesem nichttrivialen Sachverhalt Rechnung tragen soll:

$$\begin{aligned} u_j &\equiv |a_j\rangle & u_j^+ &\equiv \langle a_j| \\ u_j^+ u_k &\equiv \langle a_j|a_k\rangle & u_j \cdot u_j^+ &= |a_j\rangle\langle a_j| \\ \mathbf{A} &= \sum a_j |a_j\rangle\langle a_j| & \sum |a_j\rangle\langle a_j| &= \mathbf{1} \\ (\psi, \mathbf{A}\psi) &= \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Man bezeichnet mit

- $\langle a|$  ("bra") den zu
- $|a\rangle$  ("ket") dualen Vektor und
- $\langle a_j|a_j\rangle$  als "bracket".

Der Zustand  $|a\rangle$  ist damit Basis-unabhängig.

#### Spektraldarstellung

Die Orthonormierung für diskrete und kontinuierliche Eigenwerte  $a_j$  und  $a$  ist

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{i,j}; \quad \langle a'|a\rangle = \delta(a' - a).$$

Ein selbstadjungierter Operator  $\mathbf{A}$  kann sowohl ein kontinuierliches wie ein diskretes Spektrum haben, mit der Spektraldarstellung

$$\mathbf{A} = \underbrace{\int da a |a\rangle\langle a|}_{\text{kontinuierliches Spektrum}} + \underbrace{\sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|}_{\text{diskretes Spektrum}}.$$

Für das Wasserstoffatom sind die gebundenen Zustände mit  $E < 0$  Teil des diskreten Spektrums, die Streuzustände mit  $E \geq 0$  bilden das kontinuierliche Spektrum.

#### Ortsdarstellung

Wir betrachten den (eindimensionalen) Ortsoperator  $\mathbf{Q}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}|x\rangle &= x|x\rangle, & \mathbf{Q} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x|x\rangle\langle x|, \\ \langle x'|x\rangle &= \delta(x' - x), \\ \langle x'|\mathbf{Q}|x\rangle &= x\delta(x' - x). \end{aligned} \tag{1.1}$$

Die Entwicklung eines Zustandes  $|\psi\rangle$  sieht dann so aus:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx \psi(x) |x\rangle . \\ \langle x'|\psi\rangle &= \int dx \psi(x) \langle x'|x\rangle = \psi(x') . \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$  entspricht also der *Ortsdarstellung* von  $\psi$ . Man spricht auch von der *Schrödinger-Darstellung* des Zustandes  $|\psi\rangle$ .

### Impulsdarstellung

Für jeden Zustand  $|p\rangle$  gilt

$$|p\rangle = \left( \int dx' |x'\rangle \langle x'| \right) |p\rangle = \int dx' \langle x'|p\rangle |x'\rangle .$$

Sei nun  $|p\rangle$  Eigenvektor des Impulsoperators  $\mathbf{P}$ . Es gilt

$$\langle x|P|p\rangle = p \langle x|p\rangle, \quad \mathbf{P}\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x), \quad \langle x|p\rangle = c e^{ixp/\hbar} ,$$

wobei man den Impuls mit  $p = \hbar k$  auch durch die Wellenzahl  $k$  ausdrückt. Die Normierungskonstante bestimmt man mit Hilfe von  $\int dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1}$  aus

$$\begin{aligned} \delta(x-x') &= \langle x|x'\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle = |c|^2 \int dp e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &= |c|^2 2\pi\hbar \delta(x-x') , \end{aligned}$$

mit  $c = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ . Somit haben wir

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ixp/\hbar} .$$

Entwickelt man die Basisvektoren  $|p\rangle$  nach den Basisvektoren  $|x\rangle$ , so sind die ebenen Wellen  $\langle x|p\rangle$  die Entwicklungskoeffizienten.

## 1.2 Drehimpuls

Für die karthesischen Komponenten des Bahndrehimpuls',

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{x} \times \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \vec{\nabla}, \quad \vec{\mathbf{L}} = (L_x, L_y, L_z),$$

gelten die Kommutationsrelationen

$$[L_i, L_j] = L_i L_j - L_j L_i = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k ,$$

welche direkt aus den Kommutationsrelation  $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$  folgen.



### Eigenwerte

Ein vollständiger Satz von kommutierenden Observablen ist der Gesamtdrehimpuls  $L^2 = \vec{\mathbf{L}}^2$ , zusammen mit der  $z$ -Komponente  $L_z$  (oder  $L_3$ ). Die dazugehörigen Quantenzahlen sind  $l$  und  $m$  (oder  $l_z$  oder  $l_3$ ), mit den Wertebereichen

$$l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, \dots, l.$$

und den Eigenvektoren  $|l, m\rangle$

$$L^2|l, m\rangle = \hbar^2(l+1)l|l, m\rangle, \quad L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle. \quad (1.2)$$

Für das Wasserstoffatom mit der Hauptquantenzahl  $n$  gilt  $l = 0, 1, \dots < n$ .

### Auf- und Absteigeoperatoren

Die Leiteroperatoren  $L_{\pm}$ ,

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z, \quad [L_3, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm},$$

erlauben via

$$L_+|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|l, m+1\rangle,$$

$$L_-|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|l, m-1\rangle,$$

zwischen den verschiedenen Eigenvektoren hoch- und runterzusteigen. Es gilt

$$L_+L_- = L_x^2 + L_y^2 - i(L_xL_y - L_yL_x) = \mathbf{L}^2 - L_z^2 - 2\hbar L_z.$$

## 1.3 Die Dichte-Matrix

### Statistische Überlagerung von Zuständen

In vielen Fällen – z.B. bei atomaren Teilchen in einem Strahl, bzw. bei der Thermodynamik von quantenmechanischen Systemen – weiß man nicht, in genau welchem Zustand sich ein System befindet. Dagegen kann man gewisse Wahrscheinlichkeiten dafür angeben, das System in einem bestimmten Zustand anzutreffen.

### Zustände und Wahrscheinlichkeiten

Es sei

- $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_g)$  ein vollständiger Satz von kommutierenden, selbstadjungierten Operatoren,
- $\{|u_j\rangle, j = (j_1, \dots, j_g)\}$  die Eigenvektoren hierzu,
- $\mathbf{P}_j$  die Projektionsoperatoren auf die von den  $u_j$  aufgespannten, 1-dimensionalen Unterräume und
- $w_j, \sum_j w_j = 1$  die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand  $u_j$  zu finden.

**Dichte-Operator**Der *Dichte-Operator*

$$\rho = \sum_j w_j \mathbf{P}_j = \sum_j w_j |u_j\rangle \langle u_j|$$

hat u.a. folgende Eigenschaften:

$$\rho^+ = \rho, \quad \rho |u_j\rangle = w_j |u_j\rangle, \quad \langle u_j | \rho | u_k \rangle = \delta_{jk} w_j.$$

Die  $|u_j\rangle$  sind also Eigenfunktionen von  $\rho$  zum Eigenwert  $w_j$ . Die Dichte-Matrix ist normiert,

$$\sum_j \langle u_j | \rho | u_j \rangle \equiv \text{Sp}(\rho) = \sum_j w_j = 1.$$

Aus  $w_j^2 \leq w_j$  folgt zudem

$$\text{Sp}(\rho^2) = \sum_j w_j^2 \leq 1.$$

**Reine und gemischte Zustände**Falls das System sich mit Sicherheit in dem Zustand  $u_j$  befindet, d.h. falls  $w_j = 1$ ,  $w_k = 0$ ,  $k \neq j$ , so ist  $\rho$  Projektionsoperator:

$$\rho = \mathbf{P}_j, \quad \rho^2 = \rho.$$

Umgekehrt folgt aus  $\rho^2 = \rho$  und  $\text{Sp}(\rho) = 1$ , dass  $\rho$  ein Projektionsoperator auf einen eindimensionalen Unterraum ist. Man sagt daher, das System befinde sich in einem

- *reinen Zustand*, falls  $\rho^2 = \rho$  und in einem
- *gemischten Zustand*, falls  $\rho^2 \neq \rho$ .

Die Dichte Matrix eines reinen Zustandes lässt sich immer als

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|, \quad \rho^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1} \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi|$$

schreiben, mit einem geeigneten normierten Zustand  $|\psi\rangle$ . Ein Beispiel für einen gemischten Zustand ist

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| + |\phi\rangle \langle \phi|,$$

mit  $|\psi\rangle \neq c|\phi\rangle$ .**Boltzman-Verteilung**

Prominentes Beispiel für eine Dichte-Matrix ist der Fall eines quantenmechanischen Systems

in einem Wärmebad der Temperatur  $T$ . Die einzelnen Zustände sind dann entsprechend ihres Boltzmann-Gewichtes besetzt:

$$\rho(\mathbf{H}, T) = \frac{e^{-\beta\mathbf{H}}}{\text{Sp}(e^{-\beta\mathbf{H}})} = \sum_j |a_j\rangle \frac{e^{-\beta a_j}}{\sum_i e^{-\beta a_i}} \langle a_j|,$$

mit  $\beta = 1/(k_B T)$ .

### Erwartungswerte

Der Erwartungswert  $\langle \mathbf{A} \rangle_\rho$  eines Operators  $\mathbf{A}$  in einem durch die Dichte-Matrix  $\rho$  beschriebenen Systems ist

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\rho = \sum_k a_k w_k = \sum_k a_k \langle a_k | \rho | a_k \rangle = \sum_k \langle a_k | \rho \mathbf{A} | a_k \rangle = \text{Sp}(\rho \mathbf{A}),$$

wobei wir anfänglich mit  $\mathbf{A}|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$  vorausgesetzt haben, also dass die Dichtematrix in der Basis von  $\mathbf{A}$  definiert ist. Allgemein gilt

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\rho = \text{Sp}(\rho \mathbf{A}) = \text{Sp}(\mathbf{A} \rho),$$

da die Spur invariant unter orthogonalen Transformationen ist.

### 1.3.1 Beispiel: Spin-1/2-Teilchen

Wir betrachten einen Strahl von Teilchen mit Spin  $\hbar/2$ . Solch ein System besteht in der Regel aus  $N$  unabhängig voneinander ("inkohärent") erzeugten Teilchen, von denen für jedes einzelne der Spin durch eine 2-komponentige Wellenfunktion  $\chi = c_+ \chi_+ + c_- \chi_-$  beschrieben wird.

Die allgemeine hermitesche  $2 \times 2$ -Matrix mit einer auf Eins normierten Spur hat die Form

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \vec{P} \cdot \vec{\sigma}) \quad (1.3)$$

wobei  $\vec{P} = (P_1, P_2, P_3)$  der *Polarisationsvektor* ist und die  $\sigma_j$  die Pauli-Matrizen sind,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

mit

$$\sigma_i^2 = \mathbf{1}, \quad \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \mathbf{1},$$

wobei letzters die Anti-Kommutationsrelationen für Fermionen sind. Aus diesen folgt

$$\text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = 4\delta_{ij} - \text{Sp}(\sigma_j \sigma_i), \quad \text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}, \quad (1.4)$$

da allgemein  $\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA)$  gilt.

### Reine Zustände

Es gilt

$$\left(\vec{P} \cdot \vec{\sigma}\right)^2 = \sum_i P_i^2 \sigma_i^2 + \sum_{i < j} P_i P_j (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) = \left(\sum_i P_i^2\right) \mathbf{1} = \|\vec{P}\|^2 \mathbf{1},$$

und damit

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \left( \mathbf{1} + \|\vec{P}\|^2 \mathbf{1} + 2\vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right).$$

Mit  $\text{Sp}(\sigma_j) = 0$  erhalten wir somit

$$\boxed{\text{Sp}(\rho^2) = \frac{1}{2} (1 + \|\vec{P}\|^2)} \quad \left( \text{Sp}(\rho^2) \leq 1 \right) \Leftrightarrow \left( \|\vec{P}\|^2 \leq 1 \right).$$

Für die Darstellung der Dichte-Matrix muss also der Polarisationsvektor  $\vec{P}$  innerhalb des Einheitskreises liegen und auf dem Einheitskreis,

$$\boxed{\|\vec{P}\|^2 = 1, \quad \rho^2 = \rho}$$

für einen *reinen Zustand*.

### Polarisierung

Experimentell ist man an den Erwartungswert  $\langle \vec{n} \cdot \mathbf{S} \rangle_\rho$  des Spinoperators  $\mathbf{S}$  entlang einer Polarisierungachse  $\vec{n}$  interessiert, wobei  $\|\vec{n}\| = 1$  ist. Er lässt sich mit (1.3) und (1.4) zu

$$\boxed{\langle \vec{n} \cdot \mathbf{S} \rangle_\rho = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{P},} \quad \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

berechnen.  $\vec{n} \cdot \vec{P}$  heißt der Polarisationsgrad des Strahles in Richtung  $\vec{n}$ . Experimentell von Relevanz sind u.a. die folgende Fälle:

- $\vec{P} = 0$ : der Strahl ist bezüglich jeder Richtung unpolarisiert.
- $\vec{P} = \vec{n}$ : der Strahl befindet sich in einem reinen Zustand und ist vollständig in Richtung  $\vec{n}$  polarisiert.
- $\vec{P} = (0, 0, P_3)$ : Strahl ist nur in 3-Richtung polarisiert; falls  $P_3 = 1$ , dann handelt es sich um einen reinen Zustand, alle Spins zeigen nach oben.

Im allgemeinen hängt  $\rho$  von den 3 reellen Parametern  $P_i$  ab, d.h. man braucht 3 unabhängige Messungen, um  $\rho$  zu bestimmen.

## 1.4 Unschärfe-Relationen

### Mittlere Schwankungen

Für ein quantenmechanisches System, welches durch die Dichte-Matrix

$$\rho = \sum_j w_j |u_j\rangle \langle u_j|$$

beschrieben wird, sind wir an den mittleren Schwankungen  $\Delta A$  und  $\Delta B$  der selbstadjungierten Operatoren  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$ ,

$$\begin{aligned}\Delta A &= \sqrt{\langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \mathbf{A}^2 \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle^2}, \\ \Delta B &= \sqrt{\langle (\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \mathbf{B}^2 \rangle - \langle \mathbf{B} \rangle^2}\end{aligned}$$

interessiert. Sowohl  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger$  seien Observable, also selbstadjungiert. Dann ist auch

- $\mathbf{AB} + \mathbf{BA}$  selbstadjungiert und  $\langle u_j | \mathbf{AB} + \mathbf{BA} | u_j \rangle$  reell,
- $i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA})$  selbstadjungiert und  $\langle u_j | i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA}) | u_j \rangle$  reell.

### Unschärferelation für reine Zustände

Aus der Schwarz'schen Ungleichung

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \geq |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2$$

folgt

$$\begin{aligned}\langle u_j | \mathbf{A}^2 | u_j \rangle \langle u_j | \mathbf{B}^2 | u_j \rangle &= \langle u_j | \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} | u_j \rangle \langle u_j | \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B} | u_j \rangle \\ &\geq |\langle u_j | \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B} | u_j \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \langle u_j | \mathbf{AB} + \mathbf{BA} | u_j \rangle - \frac{i}{2} \langle u_j | i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA}) | u_j \rangle \right|^2 \\ &\geq \left| \frac{1}{2} \langle u_j | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | u_j \rangle \right|^2.\end{aligned}$$

Ersetzt man  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  durch

$$\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle, \quad \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle, \quad [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle, \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}],$$

so erhält man mit

$$\langle u_j | [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle]^2 | u_j \rangle \langle u_j | [\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle]^2 | u_j \rangle \geq \left| \frac{1}{2} \langle u_j | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | u_j \rangle \right|^2 \quad (1.5)$$

die Unschärfe-Relation für einen reinen Zustand.

### Gemische Zustände

Wir fassen

$$u_j^{(A)} = \sqrt{w_j} \sqrt{\langle u_j | [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle]^2 | u_j \rangle}$$

und

$$u_j^{(B)} = \sqrt{w_j} \sqrt{\langle u_j | [\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle]^2 | u_j \rangle}$$

als Komponenten der (unendlich dimensionalen) Vektoren

$$\vec{u}^{(A)} = (u_1^{(A)}, u_2^{(A)}, \dots), \quad \vec{u}^{(B)} = (u_1^{(B)}, u_2^{(B)}, \dots)$$

auf, auf die man ebenfalls die Schwarz'sche Ungleichung

$$\|\vec{u}^{(A)}\| \cdot \|\vec{u}^{(B)}\| \geq |\vec{u}^{(A)} \cdot \vec{u}^{(B)}|, \quad A \leftrightarrow B$$

anwenden kann. Man erhält

$$\begin{aligned} \|\vec{u}^{(A)}\| \cdot \|\vec{u}^{(B)}\| &= \left( \sum_j w_j \langle u_j | [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle]^2 | u_j \rangle \right) \left( \sum_k w_k \langle u_k | [\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle]^2 | u_k \rangle \right) \\ &\geq \left| \sum_k w_k \left( \langle u_k | [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle]^2 | u_k \rangle \langle u_k | [\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle]^2 | u_k \rangle \right)^{1/2} \right|^2 \\ &\geq \left| \frac{1}{2} \sum_k w_k \langle u_k | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | u_k \rangle \right|^2, \end{aligned}$$

und schließlich mit

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|} \quad (1.6)$$

die *allgemeine Unschärfe-Relation* für zwei Operatoren im Zustand  $\rho$ .

### Heisenberg'sche Unschärferelation

Für  $\mathbf{A} = \mathbf{P}$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{Q}$  ist  $[\mathbf{P}, \mathbf{Q}] = \hbar/i$  und es ergibt sich

$$\boxed{(\Delta P)(\Delta Q) \geq \frac{\hbar}{2}.}$$

### Minimale Unschärfe

Wellenfunktionen  $\psi(x)$ , für welche Ort- und Impuls zugleich maximal scharf sind, nennt man Zustände *minimaler Unschärfe*. Beispiele sind

$$\psi(x) \sim e^{ip_0x/\hbar} e^{-\gamma(x-x_0)^2/(2\hbar)},$$

d.h. die Gaußschen Wellenpakete. Sie haben die Eigenschaft  $(\Delta Q)(\Delta P) = \frac{\hbar}{2}$ .