3. Der allgemeine Formalismus der Quantenmechanik

Obwohl die Schrödinger-Gleichung ausgezeichnet gut funktioniert, kann es nicht die ganze Wahrheit darstellen: zum Beispiel gibt es keinen Platz für Information über den Spinzustand des Teilchens.
Um Verallgemeinerungen zu ermöglichen, müssen wir die wesentliche Struktur der Quantenmechanik „abstrakter" ausdrücken können.

3.1 Zustände, Observablen, Erwartungswerte

[Fliessbach 14,16,30,33; Griffiths 3.1, 3.2, 3.6]

Physikalische Objekte (Teilchen, Wellen, Körper, ...) werden als Zustände betrachtet. Dirac-Notation: $|\psi\rangle$, „ket-Vektor".

Die Zustände bilden einen komplexen Vektorraum $\mathcal{V}$ (Superposition):

$$|\psi_1\rangle,\ |\psi_2\rangle \in \mathcal{V} \Rightarrow \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \in \mathcal{V} \quad \forall\, \alpha,\beta \in \mathbb{C}.$$

Für jeden $|\psi\rangle$ gibt es einen „konjugierten" Vektor $\langle\psi|$, einen „bra-Vektor". Diese bilden einen „dualen" Vektorraum $\mathcal{V}^*$.

Weiterhin sei ein komplexwertiges Skalarprodukt definiert:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}. \qquad \text{„bracket"}$$

Es gelten die Eigenschaften

* $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$
* $\langle\psi_1|\alpha\psi_2+\beta\psi_3\rangle = \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle$

$$\left(\Rightarrow \langle\alpha\psi_2+\beta\psi_3|\psi_1\rangle = \left[\alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle+\beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle\right]^* = \alpha^*\langle\psi_2|\psi_1\rangle + \beta^*\langle\psi_3|\psi_1\rangle.\right)$$

* $\langle\psi|\psi\rangle =: \|\psi\|^2 \geq 0$ $\qquad \|\psi\|$ = die „Norm" von $|\psi\rangle$
* $\|\psi\| = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = |0\rangle$ $\qquad$ „Nullvektor";
  $|0\rangle = 0\cdot|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle - |\psi_1\rangle$.

Falls $\|\Psi\| < \infty$ für $\forall\, |\Psi\rangle \in \mathcal{V}$ ist $\mathcal{V}$ ein <u>Hilbert-Raum</u>.
Dies wird im Folgenden angenommen; Streuzustände müssen dann „regularisiert" werden, z.B. durch ein endliches Volumen V (vgl. Aufgabe 8.2).
Es wird postuliert, dass $|\Psi\rangle$ und $\alpha|\Psi\rangle$, $\alpha \in \mathbb{C}$, dieselbe physikalische Information enthalten; damit können wir uns auf normierte Zustände, $\|\Psi\| = 1$, beschränken.

Sei $\hat{A}$ jetzt ein linearer <u>Operator</u> bzw. Abbildung $\hat{A}: \mathcal{V} \to \mathcal{V}$:

$$\hat{A}\left[\alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle\right] = \alpha \hat{A}|\Psi_1\rangle + \beta \hat{A}|\Psi_2\rangle \,.$$

Die Eigenzustände von $\hat{A}$ sind $|a\rangle$: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, $a \in \mathbb{C}$.
Physikalische Grössen (Energie, Impuls, Drehimpuls, Ort, ...) werden durch solche Operatoren dargestellt. Insbesondere sollten in diesem Fall alle möglichen <u>Messwerte</u> „a" reell sein; ein solcher Operator wird dann eine <u>Observable</u> genannt.

* Wellenfunktion in „a - Darstellung": $\Psi(a) := \langle a|\Psi\rangle$.
* z.B. $\hat{A} := \hat{x} \quad \Rightarrow \quad \Psi(x) := \langle x|\Psi\rangle$.
* Wahrscheinlichkeit für den Eigenwert a im Zustand $|\Psi\rangle$:

$$P_\Psi(a) := |\langle a|\Psi\rangle|^2 \,.$$

<u>Orthonormierung</u>: $\quad \langle a'|a\rangle = \delta_{aa'}$

<u>Vollständigkeit</u>:

$$1 = \sum_a P_\Psi(a) = \sum_a \langle\Psi|a\rangle\langle a|\Psi\rangle$$

$$= \langle\Psi|\Big(\sum_a |a\rangle\langle a|\Big)|\Psi\rangle \qquad \forall\, |\Psi\rangle$$

„$\Rightarrow$" $\quad \sum_a |a\rangle\langle a| = \hat{\mathbb{1}} =$ Einheitsoperator,

$\|\Psi\|=1$

mit $\hat{\mathbb{1}}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad \forall\, |\Psi\rangle$.

Erwartungswerte

$$\langle \hat{A} \rangle := \sum_a a \, P_\psi(a) = \sum_a a \, \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left(\sum_a |a\rangle a \langle a| \right) |\psi\rangle =: \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Also erhalten wir eine Spektraldarstellung für $\hat{A}$:

$$\hat{A} = \sum_a |a\rangle a \langle a| \, .$$

Eine andere Begründung für dieselbe Schreibweise:

$$\hat{A} = \hat{A}\,\hat{\mathbb{1}} = \hat{A} \sum_a |a\rangle\langle a| = \sum_a a |a\rangle\langle a| = \sum_a |a\rangle a \langle a| \, .$$

Unter welchen Bedingungen ist $\hat{A}$ eine Observable?

Der zu $\hat{A}$ „adjungierte" Operator $\hat{A}^+$ wird definiert durch

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle =: \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle \qquad \forall \; |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \, .$$

Wie lautet die Spektraldarstellung von $\hat{A}^+$?

$$\hat{A}^+ = \hat{\mathbb{1}} \, \hat{A}^+ \, \hat{\mathbb{1}} = \sum_{a', a} |a'\rangle \underbrace{\langle a' | \hat{A}^+ | a \rangle}_{} \langle a|$$

$$\langle a' | \hat{A}^+ a \rangle = \langle \hat{A}^+ a | a' \rangle^* = \langle a | \hat{A} a' \rangle^* = a'^* \langle a | a' \rangle = a'^* \delta_{aa'}$$

$$= \sum_a |a\rangle a^* \langle a| \, .$$

Aber a sind reell für physikalische Observablen

$$\Rightarrow \quad \hat{A}^+ = \hat{A} \qquad (\text{„selbstadjungiert"})$$

$$\Rightarrow \quad \langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle \qquad \forall \; |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$$

(„hermitesch")

(In der Physik nennt man $\hat{A}^+ = \hat{A}$ schon „hermitesch.")

Basiswechsel

Sei $\hat{B}$ eine andere Observable.

Vollständigkeit: $\hat{\mathbb{1}} = \sum_b |b\rangle\langle b|$.

„Übergangsamplitude"

Dann gilt: $\psi(a) = \langle a|\psi\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle\langle b|\psi\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle \psi(b)$.

Umgekehrt: $\psi(b) = \sum_a \langle b|a\rangle\, \psi(a)$.

Bei Operatoren: $\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}} = \sum_{b,b'} |b\rangle A_{bb'} \langle b'|$,

wobei $A_{bb'} := \langle b|\hat{A}|b'\rangle$ die Matrixelemente von $\hat{A}$ in der Eigenbasis von $\hat{B}$ sind.

Kontinuierliches Spektrum

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_a |a\rangle\langle a| + \int da\ |a\rangle\langle a|$$

$$\hat{A} = \sum_a |a\rangle a \langle a| + \int da\ |a\rangle a \langle a|$$

$\langle a|a'\rangle = \delta_{aa'}$ (diskret) bzw. $\delta(a-a')$ (kontinuierlich)
[falls nicht regularisiert!]

Zusammenfassung: Postulate der Quantenmechanik (I - III)

I. Reine Zustände werden durch normierte Vektoren eines komplexen Hilbert-Raumes repräsentiert.

II. Den Observablen eines Systems entsprechen selbstadjungierte Operatoren. Die möglichen Messwerte sind die Eigenwerte des Operators.

III. Der Erwartungswert der Observablen $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$ ist durch $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ gegeben.