6. Postulate der Quantenmechanik

(I) Zustände:

(a) Der Zustand eines physikalischen Systems ist durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem Hilbert- bzw. Dirac-Raum gegeben.

(b) Mit $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ ist auch $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ mit $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ ein möglicher Zustand des Systems ("Superpositionsprinzip")

II) Messungen:

(a) Für jede messbare physikalische Größe ("Observable") existiert ein hermitescher Operator $\hat{A}$.

(b) Das Ergebnis einer (idealen) Messung von $\hat{A}$ ist ein Eigenwert von $\hat{A}$.

(c) Sei $\{|a_n i\rangle\}$ mit $i=1,\dots,m$ eine orthonormierte Basis des Eigenraums von A zu dem m-fach entarteten Eigenwert a_n, $\hat{A}|a_n i\rangle = a_n |a_n i\rangle$ für $i=1,\dots,m$. Eine Messung der Observablen $\hat{A}$ am System im Zustand $|\varphi\rangle$ liefert den Messwert a_n mit der Wahrscheinlichkeit

Entwicklungskoeffizient von $|\varphi\rangle$ in Eigenbasis von A

$$p_n = \frac{\sum_{i=1}^{m} |\langle a_n i|\varphi\rangle|^2}{\langle\varphi|\varphi\rangle} = \frac{\langle\varphi|\hat{P}_n|\varphi\rangle}{\underbrace{\langle\varphi|\varphi\rangle}_{=1 \text{ für normierten Zustand}}}$$

mit dem Projektionsoperator

$$\hat{P}_n = \sum_{i=1}^{m} |a_n i\rangle\langle a_n i|$$

auf den m-dimensionalen Eigenraum von a_n, $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$.

(III) Zeitentwicklung:

Die Zeitentwicklung eines Zustandes $|\psi\rangle \equiv |\psi(t)\rangle$ wird durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben:

$$i\hbar\,\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$$

Der Hamilton-Operator ist hermitesch, $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$.

Bemerkungen:

- Für gebundene Zustände wird im Allg. Normierung vorausgesetzt: $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$
- Welcher Eigenwert bei einer Messung resultiert, kann i. Allg. nicht eindeutig vorhergesagt werden (!)
  Ausnahme: $|\varphi\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{A}$ zum Eigenwert a_{n_0} $\Rightarrow$ $p_n = \delta_{n n_0}$
- Bei einer Vielzahl von Messungen kann der mittlere Messwert ("Erwartungswert") der Observable A im Zustand $|\varphi\rangle$ bestimmt werden:

$$\langle A\rangle_\varphi = \sum_n p_n a_n$$

$$= \sum_n \langle\varphi|\hat{P}_n|\varphi\rangle\, a_n \qquad (\text{für } \langle\varphi|\varphi\rangle = 1)$$

$$= \langle\varphi|\underbrace{\sum_n a_n \hat{P}_n}_{=\sum_n\sum_i a_n |a_n i\rangle\langle a_n i| \,=\, \hat{A} \ (\text{Spektraldarstellung})}|\varphi\rangle$$

$$= \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle \qquad \checkmark$$

Beispiel (Qubit):

Hilbert-Raum mit Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ (orthonormiert)

Zustand

$$|\varphi\rangle = \lambda_1 |0\rangle + \lambda_2 |1\rangle \quad , \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

Normierung: $\langle\varphi|\varphi\rangle = \left(\langle 0| \lambda_1^* + \langle 1| \lambda_2^*\right)\left(\lambda_1 |0\rangle + \lambda_2 |1\rangle\right) = |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 \overset{!}{=} 1$

Observable (Beispiel): $\hat{A} = |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| = \hat{A}^\dagger$

Matrixelemente bzgl. der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \langle 0|\varphi\rangle \\ \langle 1|\varphi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}$$

$$(A_{mn}) = \begin{pmatrix} \langle 0|\hat{A}|0\rangle & \langle 0|\hat{A}|1\rangle \\ \langle 1|\hat{A}|0\rangle & \langle 1|\hat{A}|1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Eigenwerte: $a_+ = +1 \quad , \quad a_- = -1$

Eigenvektoren: $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad , \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$

$$\vec{\psi}_+ = \begin{pmatrix} \langle 0|+\rangle \\ \langle 1|+\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{\psi}_- = \begin{pmatrix} \langle 0|-\rangle \\ \langle 1|+\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Wahrscheinlichkeit für Messwert $a_\pm = \pm 1$:

$$\begin{aligned} p_\pm &= |\langle \pm|\varphi\rangle|^2 \\ &= |\vec{\psi}_\pm^\dagger \vec{\varphi}|^2 \\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_1 \pm \lambda_2)\right|^2 \end{aligned}$$

6.1. Kopenhagener Interpretation und Messprozess

Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik (Bohr & Heisenberg, 1927):

(IV) Messprozess:

Bei einer (idealen) Messung von $\hat{A}$ mit dem Ergebnis a_n kollabiert die Wellenfunktion und wird auf den Eigenraum zum Eigenwert a_n von $\hat{A}$ projiziert:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |\tilde{\psi}\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{\| P_n|\psi\rangle \|}$$

mit dem Projektor P_n auf den Eigenraum von a_n.

Bemerkungen:

- Sofortige zweite Messung von $\hat{A}$ liefert Messwert a_n mit $p_n = 1$, da $\hat{A}|\tilde{\psi}\rangle = a_n|\tilde{\psi}\rangle$.
- Falls a_n nicht-entartet, so ist $|\tilde{\psi}\rangle$ eindeutig (bis auf eine Phase) und unabhängig von $|\psi\rangle$
- Kopenhagener Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist die Standard-Interpretation der Quantenmechanik, alternative Deutungen sind möglich (Bohmsche Mechanik, Viele-Welten-Interpretation, ...)
- Schrödingers-Katze-Paradoxon: Überlagerung von makroskopischen Quantenzuständen $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{tot}\rangle + |\text{lebendig}\rangle)$ problematisch
  $\Rightarrow$ Dekohärenztheorie

Beispiel (Qubit):

Ausgangszustand: $|\psi\rangle = \lambda_1 |0\rangle + \lambda_2 |1\rangle$

Messung von $\hat{A} = |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|$: $a_+ = 1$ (Ann.)

Zustand nach Messung:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \frac{|+\rangle\langle +|\psi\rangle}{\| |+\rangle\langle +|\psi\rangle \|} = \frac{\frac{\lambda_1+\lambda_2}{\sqrt{2}} |+\rangle}{\left| \frac{\lambda_1+\lambda_2}{\sqrt{2}} \right|} = e^{i\phi} |+\rangle \quad \text{mit } \phi = \arg(\lambda_1+\lambda_2)$$

6.2. Zeitentwicklung und Heisenberg-Bild

Zeitentwicklung (Schrödinger-Gleichung):

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}$:

$$\hat{U}: \quad |\psi(t_0)\rangle \mapsto |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Einsetzen in Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t,t_0) = \hat{H} \hat{U}(t,t_0) \qquad \text{Operator-Differentialgleichung}$$

Anfangsbedingung:

$$\hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1}$$

Lösung:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-i\,\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

$$\equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left[-i\,\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]^k \qquad \text{(falls } \hat{H} \text{ zeitunabhängig)}$$

Entwicklung in Basiszustände von $\hat{H}$ $\left(\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle\right)$:

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n |\varphi_n\rangle \qquad \text{mit} \quad \tilde{c}_n = \langle \varphi_n | \Psi(t_0)\rangle$$

Zeitentwicklung (Zustand):

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

$$= \sum_n \tilde{c}_n \hat{U}(t,t_0)|\varphi_n\rangle$$

$$= \sum_n \tilde{c}_n e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}} |\varphi_n\rangle$$

Mit $c_n \equiv \tilde{c}_n e^{+iE_n t_0/\hbar}$:

$$\boxed{|\Psi(t)\rangle = \sum_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} c_n |\varphi_n\rangle}$$

Zeitentwicklung (Erwartungswert):

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi (t) = \langle \Psi(t) | \overset{\text{zeitlich konstant}}{\hat{A}} | \underset{\text{zeitabhängig}}{\Psi(t)} \rangle$$

"Schrödinger-Bild"

$$= \langle \Psi(t_0) | \underbrace{\hat{U}^\dagger(t,t_0)\, \hat{A}\, \hat{U}(t,t_0)}_{=:\hat{A}_H(t)} | \underbrace{\Psi(t_0)\rangle}_{=:|\Psi_H\rangle}$$

$$= \langle \Psi_H | \underset{\text{zeitabhängig}}{A_H(t)} | \underset{\text{zeitlich konstant}}{\Psi_H} \rangle$$

"Heisenberg-Bild"

Heisenberg-Bild:

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi(t_0)\rangle$$ zeitunabhängige Zustände

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\, \hat{A}\, \hat{U}(t,t_0)$$ zeitabhängige Operatoren

Schrödinger-Bild:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t,t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$ zeitabhängige Zustände

$$\hat{A}(t) \equiv \hat{A}$$ zeitunabhängige Operatoren (falls nicht explizit zeitabhängig)

Beide Bilder sind äquivalent (unitäre Transformation!).

Bewegungsgleichung (Heisenberg-Bild):

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}\hat{U}(t,t_0)\right)$$

$$= \underbrace{\left(\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t,t_0)\right)}_{=+\frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}}\hat{A}\,\hat{U}(t,t_0) + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,\hat{A}\underbrace{\left(\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0)\right)}_{=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t,t_0)} \quad \left(\text{falls } \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = 0\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(U^\dagger \underset{\overset{\wedge}{\mathbb{1}}}{\hat{H}\,\hat{A}}\,\hat{U} - U^\dagger \underset{\overset{\wedge}{\mathbb{1}}}{\hat{A}\,\hat{H}}\,\hat{U}\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(U^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_H\hat{A}_H - \hat{A}_H\hat{H}_H\right)$$

Hamilton-Operator (Heisenberg-Bild):

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}\,\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}$$ identisch mit Schrödinger-Bild

Heisenberg-Gleichung:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_H, \hat{A}_H\right] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H}$$

Bemerkungen:

- Term $\left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)_H = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)$ berücksichtigt mögliche <u>explizite</u> Zeitabhängigkeit (Beispiel: zeitabhängiges Potential $V(\vec{r},t)$).

- Falls $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$: $\quad [\hat{A}_H, \hat{H}_H] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d\hat{A}_H}{dt} = 0 \quad$ "$\hat{A}_H$ ist erhalten"

Symmetrie $\Leftrightarrow$ Erhaltungsgröße

$\Rightarrow$ quantenmechanisches Noether-Theorem

6.3. Verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation

Schwankung:

$$\Delta A = \sqrt{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle}$$

$$= \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$$

$$= \sqrt{\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2}$$

Es gilt:

$\Delta A = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle$ Eigenzustand von $\hat{A}$

Allgemeine Heisenberg'sche Unschärferelation:

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|}$$

Interpretation: Nur kommutierende Observablen können gleichzeitig "scharf" sein.

Bemerkungen:

- Beweis analog zu Kap. 3.8: $I(\lambda) = \|\hat{Q}\psi\|^2 = \langle\psi|\hat{Q}^+\hat{Q}|\psi\rangle \geq 0$

  mit $\hat{Q} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\mathbb{1} + i\lambda\left(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\mathbb{1}\right)$

- Orts-Impuls-Unschärferelation: $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \Rightarrow \Delta r_i\, \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}$