

Kapitel 3

Der mathematische Apparat der Quantenmechanik

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der allgemeinen (abstrakten) Theorie quantenmechanischer Prozesse, insbesondere mit den Begriffen *Zustandsraum* und *Observable* sowie deren Eigenschaften. Anschließend diskutieren wir die Konsequenzen für den physikalischen Messprozess, sowie Genauigkeit und Grenzen der Messung.

Quantenmechanische Prozesse können in sehr unterschiedlicher Weise mathematisch beschrieben werden. Der erste Weg ist – wie wir bereits gesehen hatten – durch die Wellengleichung für $\psi(\underline{r}, t)$ beschrieben. Dies geht auf Erwin Schrödinger (1926) zurück. Werner Heisenberg fand eine andere Beschreibung; die sogenannte Matrizen-Mechanik. Dirac zeigte dann, dass die beiden Beschreibungen äquivalent sind. Eine Umformulierung der Schrödingergleichung durch gekoppelte Gleichungen für die (reelle) Amplitude und Phase der Wellenfunktion¹ geht auf Erwin Madelung, David Bohm und andere zurück. Alternativ beschrieb Richard Feynman die Quantenmechanik durch Pfadintegrale². Heute wissen wir, dass dies nur Beispiele verschiedener Darstellungen sind, die alle äquivalent sind. Die abstrakte mathematische Formulierung der Quantenmechanik erfolgte vor allem durch John von Neumann.

3.1 Zustandsvektoren im Hilbertraum

Wir erinnern uns an die bisherige Beschreibung der Quantenmechanik und benutzen hierzu erneut das Doppelspaltexperiment.

¹Diese Formulierung wird auch als *Quanten-Hydrodynamik* bezeichnet, s. z.B. [Bonitz et al., 2019]

²Wegen Zeitmangels sind diese nicht Gegenstand unserer Vorlesung. Diese Methode verwenden wir z.B. in der Quantenstatistik, insbesondere bei Quanten-Monte Carlo-Simulationen.

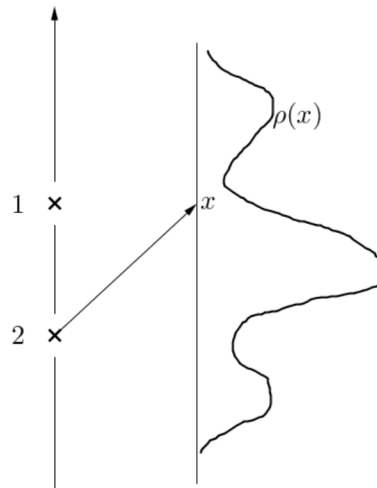


Abbildung 3.1: Skizze des Doppelspaltversuchs

Bisher hatten wir eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(x)$ benutzt, um quantenmechanische Prozesse zu beschreiben. Hieraus konnten wir die Wahrscheinlichkeitsdichte, $\rho(x) = |\psi(x)|^2$, berechnen. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude genügte dem Superpositionsprinzip:

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x).$$

Überlegen wir uns nun, welche Information eigentlich in $\psi_1(x)$ steckt: wir wissen, dass das Teilchen vom Ort 1 zum Ort x gelangt ist.

1. Wir können nun Zustände in einer einfachen Notation beschreiben. Hierbei verwenden wir “bra”- und “ket”- Zustände³, die den Anfangs- und Endzuständen entsprechen.

(a) Der Anfangszustand ist, dass das Teilchen am Ort 1 ist. Wir bezeichnen dies mit:

$$|1\rangle$$

Oder, wenn das Teilchen am Anfang im Zustand 2 war:

$$|2\rangle$$

Wenn wir angeben wollen, dass das Teilchen entweder am Ort 1 oder am Ort 2 war, schreiben wir:

$$|12\rangle$$

- (b) Analog können wir Endzustände beschreiben. Wollen wir etwa sagen, dass sich das Teilchen im Endzustand bei x befindet so schreiben wir:

$$\langle x|$$

2. Die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand zu einem anderen ist nun durch das Aneinanderfügen von Symbolen für den Anfangs- und Endzustand, aber gleichzeitig auch durch die Wellenfunktion gegeben. So gilt in unserem Beispiel für $i = 1, 2$:

$$\psi_i(x) = \langle x|i\rangle$$

³Sie wurden von Dirac eingeführt.

Tauscht man Anfangs- und Endzustand, so muss man die Wellenfunktion komplex konjugieren (das wissen wir bereits aus dem Verhalten der Schrödingergleichung bei Zeitumkehr):

$$\psi_i^*(x) = \langle i|x \rangle$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist dann gegeben durch:

$$\rho_i(x) = |\langle x|i \rangle|^2$$

Nun ist jedoch noch nicht klar, wie das Produkt $\langle x|i \rangle$ zu verstehen ist. Es handelt sich hierbei um ein unitäres Produkt von 2 Symbolen aus beiden Klassen. Dies besprechen wir in Kürze.

3. Aus dem Superpositionsprinzip

$$|12\rangle = |1\rangle + |2\rangle$$

folgt für alle x :

$$\langle x|12\rangle = \langle x|1\rangle + \langle x|2\rangle$$

Die obigen drei Eigenschaften sind die algebraischen Eigenschaften eines unitären Vektorraums⁴, nämlich des Hilbertraums \mathcal{H} . Hierbei sind die

$$|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \dots \in \mathcal{H},$$

und die Endzustände sind Elemente des “dualen” Raums $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$\langle\varphi|, \langle\psi|, \dots \in \tilde{\mathcal{H}}.$$

Dirac postulierte nun, dass dies Allgemeingültigkeit besitzt, d.h. dass die *Quantenmechanik eine Zustandsbeschreibung im Hilbertraum* ist.

Erinnerung: Bevor wir zu den Eigenschaften der Zustandsvektoren kommen, wollen wir uns einmal die Eigenschaften der Elemente des zweidimensionalen euklidischen Vektorraums \mathbb{R}_2 in Erinnerung rufen. Seien also $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}_2$ und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$. Sei weiter $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2\}$ eine Basis in \mathbb{R}_2 mit $||\hat{e}_i|| = 1$ und $\hat{e}_i \hat{e}_j = \delta_{ij}$ (Orthonormalität). Dann gilt:

1. Linearität:

$$\lambda_1 \vec{a} + \lambda_2 \vec{b} \in \mathbb{R}_2.$$

2. Es existiert ein Skalarprodukt mit:

$$\vec{a} \circ \vec{b} = \vec{b} \circ \vec{a} = \lambda \in \mathbb{R}$$

3. Es gibt eine Koordinatenform:

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^2 a_i \hat{e}_i = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix},$$

mit der wir das Skalarprodukt umschreiben können:

$$\begin{aligned} \vec{a} \circ \vec{b} &= \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ &= a_1 b_1 + a_2 b_2 = \sum_{i=1}^2 a_i b_i \end{aligned}$$

⁴Im allgemeinen hat dieser Raum in der Quantenmechanik die Dimension ∞ .

Eigenschaften der Zustandsvektoren

Für die Zustandsvektoren stellen wir ganz ähnliche Eigenschaften wie im zuvor besprochenen Beispiel fest. Das unitäre Produkt nimmt nun den Platz des Skalarproduktes ein.

1. Mit $c \in \mathbb{C}$ und $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und $\langle\varphi| \in \tilde{\mathcal{H}}$ gilt:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* = c$$

2. Mit diesem Skalarprodukt kennen wir auch die Norm eines Zustandsvektors:

$$||\psi||^2 = \langle\psi|\psi\rangle > 0,$$

für alle $\psi \neq 0$. Es gilt

$$||\psi||^2 = 0 \iff |\psi\rangle \equiv 0$$

3. Wir haben nun zwei Linearitätsbeziehungen.

- (a) Mit $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ und $\lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$ gilt Linearität bezüglich des rechten Zustandsvektors:

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 \langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2 \langle\varphi|\psi_2\rangle$$

- (b) Mit $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \tilde{\mathcal{H}}$ und $\lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$ gilt eine modifizierte Linearitätsrelation bezüglich des linken Zustandsvektors:

$$\begin{aligned} \langle\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|\varphi\rangle &= \langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle^* \\ &= \lambda_1^* \langle\varphi|\psi_1\rangle^* + \lambda_2^* \langle\varphi|\psi_2\rangle^* \\ &= \lambda_1^* \langle\psi_1|\varphi\rangle + \lambda_2^* \langle\psi_2|\varphi\rangle \end{aligned}$$

Da hierbei die Koeffizienten komplex konjugiert werden, spricht man von “Anti-Linearität”.

4. Sei nun $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots\}$ eine Basis in \mathcal{H} mit $|||\varphi_i\rangle|| = 1$ und $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. Für jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ können wir dann

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |\varphi_n\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

schreiben. Ebenso für jedes $\langle\psi| \in \tilde{\mathcal{H}}$:

$$\langle\psi| = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n^* \langle\varphi_n|$$

Mit dieser Koordinatendarstellung der Zustandsvektoren aus dem Hilbertraum und dem dualen Raum können wir das unitäre Produkt in folgender Weise darstellen:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = (\psi_1^* \quad \dots \quad \psi_N^*) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}$$

Ebenso können wir das unitäre Produkt des Rückprozesses ausdrücken durch:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = (\varphi_1^* \quad \dots \quad \varphi_N^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

Vergleichen wir diese beiden Gleichungen so können wir den Übergang zwischen \mathcal{H} und $\tilde{\mathcal{H}}$ ablesen. Und zwar geht der rechte in den linken Zustandsvektor durch *komplexe Konjugation aller Einträge und Transposition* über. Wir schreiben dies

$$\langle \psi | = (|\psi\rangle)^\dagger \quad (3.1)$$

und nennen $\langle \psi |$ *hermitesch adjungiert* zu $|\psi\rangle$. In unserem Beispiel haben wir abzählbare N -dimensionale Zustandsvektoren besprochen (N kann dabei Unendlich sein). Dies wären zum Beispiel die Energien der gebundenen Zustände im Potentialtopf. Wir wissen bereits, dass auch kontinuierliche Zustände möglich sind. Zum einen gilt dann $N \rightarrow \infty$. Zum anderen sind die Zustände dann nicht mehr abzählbar.

5. Bisher haben wir noch nicht erwähnt, dass die Basis $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots\}$ vollständig sein muss, d.h. die Basis muss die Dimension von \mathcal{H} bzw. $\tilde{\mathcal{H}}$ haben. Dabei kann entweder eine kontinuierliche oder abzählbare diskrete Basis vorliegen⁵.

Die Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeitsdichte lässt sich nun, aufgrund der Orthogonalität und Normierung der Basis, im diskreten Fall für die “Koordinaten” des Zustandes $|\psi\rangle$ schreiben als:

$$1 = \sum_{i=1}^N \rho_i = \sum_{i=1}^N \psi_i^* \psi_i,$$

während im kontinuierlichen (wir ersetzen den Index “i” durch ein kontinuierliches Argument “x” und die Summe durch das Integral) Fall gilt:

$$1 = \int \psi^*(x) \psi(x) dx.$$

Wir reproduzieren damit unsere bisherigen Normierungsbedingungen. Dabei wird deutlich, dass es sich um einen Spezialfall der Koordinatendarstellung der Zustandsvektoren handelt.

3.2 Observable und Operatoren im Hilbertraum

In der klassischen Mechanik erfordert die Zustandsbeschreibung eines Teilchens die genaue Kenntnis des Ortes \underline{r} und des Impulses \underline{p} . Kennt man diese Größen, so lässt sich eine beliebige physikalische Größe A als Funktion des Ortes und des Impulses ausdrücken,

$$A \rightarrow A(\underline{r}, \underline{p}).$$

Ein Beispiel ist die Hamiltonfunktion $H(\underline{r}, \underline{p}) = p^2/2m + V(r)$. Wir wenden nun wieder das *Korrespondenzprinzip* an, welches besagt, dass sich die zentralen funktionalen Zusammenhänge zwischen Größen der klassischen Physik in der Quantenphysik nicht ändern⁶. Das bedeutet, dass

⁵Im allgemeinen kann eine Basis auch eine Mischung aus diskreten und kontinuierlichen Zuständen enthalten, wie z.B. Bindungs- bzw. Streuzustände beim Wasserstoffatom.

⁶Dies ist natürlich eine Hypothese. Ein Argument dafür ist, dass die klassische Physik als Grenzfall der Quantenphysik folgt.

die Funktion $A(\underline{r}, \underline{p})$ unverändert bleibt und nur operatorwertig wird und auch die Argumente durch die entsprechenden Operatoren zu ersetzen sind:

$$A(\underline{r}, \underline{p}) \rightarrow \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}). \quad (3.2)$$

Darüber hinaus ist zu fordern, dass dieser Operator \hat{A} auf beliebig Zustände $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ wirkt. Wir fordern darüber hinaus, dass die Wirkung des Operators nicht aus dem Hilbertraum heraus führt,

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (3.3)$$

Diese Forderungen schränken die Auswahl der für uns interessanten Operatoren ein. Es folgen die nun aufgelisteten Eigenschaften, der für die Quantenmechanik relevanten Operatoren:

1. Zunächst gilt die Linearität. Es gilt also:

$$\underbrace{\hat{A}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)}_{|\varphi_1 + \varphi_2\rangle} = \underbrace{\hat{A}|\psi_1\rangle}_{|\varphi_1\rangle} + \underbrace{\hat{A}|\psi_2\rangle}_{|\varphi_2\rangle}$$

2. Die Zustandsvektoren im Hilbertraum und die Zustandsvektoren des dualen Raums sind gleichberechtigt. Wegen der Linearität in \mathcal{H} , folgt für die Wirkung in $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$\begin{aligned} (\langle\psi_1| + \langle\psi_2|)\hat{A} &= \langle\psi_1|\hat{A} + \langle\psi_2|\hat{A} \\ \langle(\varphi_1 + \varphi_2)| &= \langle\varphi_1| + \langle\varphi_2| \end{aligned}$$

Hierbei sind natürlich alle $\langle\varphi_i|$ Elemente des dualen Raums.

3. Wir untersuchen nun den Zusammenhang der Wirkung der Operatoren in \mathcal{H} und in $\tilde{\mathcal{H}}$. Nehmen wir also ein $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Dann gilt:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$$

Wir kennen auch den Zusammenhang mit dem dualen Vektor:

$$\langle\psi| = [|\psi\rangle]^\dagger \in \tilde{\mathcal{H}},$$

woraus wir nun die Wirkung auf $\langle\psi|$ finden:

$$\begin{aligned} \langle\varphi| &= [|\varphi\rangle]^\dagger = [\hat{A}|\psi\rangle]^\dagger \\ &= [|\psi\rangle]^\dagger \hat{A}^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger \equiv \hat{A}^\dagger \langle\psi| \in \tilde{\mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Hierbei ist \hat{A}^\dagger der zu \hat{A} *hermitesch adjungierte Operator*. Ein wichtiger noch zu besprechender Fall ist der eines hermiteschen Operators mit $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

4. Eine weitere wichtige Forderung ist, dass die Resultate von Messungen in der Regel reelle Größen sind (mit Ausnahmen, die vom Experiment abhängen). Anders formuliert, erwarten wir, dass Operatoren physikalischer Observabler einen reellen Erwartungswert (das Resultat einer Messreihe in einem Zustand $|\psi\rangle$) besitzen:

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi \in \mathbb{R},$$

wobei der Zustand $|\psi\rangle$ beliebig ist. Wenn wir diesen Erwartungswert nun definieren⁷ als

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \quad (3.5)$$

⁷Eine Ableitung dieses Ausdrucks geben wir etwas später.

so fordern wir also:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle .\end{aligned}$$

Hieraus können wir folgende Bedingung für reelle Erwartungswerte ablesen:

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} . \quad (3.6)$$

Zusätzlich hierzu müssen die Operatoren \hat{A} und \hat{A}^\dagger den selben Definitionsbereich haben. Man sagt dann, \hat{A} ist *selbstadjungiert*. Auch nicht selbstadjungierte Operatoren treten in der Quantenmechanik auf – wie zum Beispiel die Leiteroperatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger . Diese haben jedoch keinen Zusammenhang mit direkt messbaren Größen. Zusammenfassend kommen wir zur der Aussage:

Die Quantenmechanik ist die Theorie der selbstadjungierten linearen Operatoren im Hilbertraum.

5. Kommen wir nun zur Koordinatendarstellung der Operatoren und besprechen die sogenannten Matrixelemente der Operatoren. Analog zur Koordinatendarstellung der Zustandsvektoren, bei der der abstrakte Zustand durch eine Gesamtheit von C-Zahlen dargestellt wird, existiert eine Koordinatendarstellung der Operatoren durch C-Zahlen. Es ist leicht einzusehen, dass diese die Form einer Matrix haben muss. Sei also $\{|\psi_i\rangle\}$ eine vollständige orthonormierte Basis in \mathcal{H} . Die Komponenten von \hat{A} in dieser Basis (ihre Gesamtheit) bestimmen den Operator \hat{A} dann eindeutig. Ein Matrixelement definieren wir als:

$$A_{ij} = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle \in \mathbb{C} . \quad (3.7)$$

Damit gilt:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \hat{A} \quad (3.8)$$

Die Elemente mit $i = j$ sind also die Erwartungswerte im Zustand $|\psi_i\rangle$. Die Elemente A_{ij} mit $i \neq j$ stellen dagegen die Übergangswahrscheinlichkeit von $|\psi_j\rangle$ zu $|\psi_i\rangle$ unter der Wirkung von \hat{A} dar. Die Matrix umfasst also alle Übergangsprozesse zwischen den Zuständen der Basis und damit alle möglichen Anfangs- und Endzustände.

6. Die Koordinatendarstellung des hermitesch adjungierten Operators ergibt sich – analog zu den Zustandsvektoren – durch hermitesche Adjungation der Matrix (3.8) – also durch komplexe Konjugation und Transposition

$$\begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \dots \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \dots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \hat{A}^\dagger \quad (3.9)$$

Beispiel Ortsdarstellung: Als ein Beispiel besprechen wir die Ortsdarstellung und wählen daher als Basis die Eigenzustände des Operators \hat{x} . Diese Eigenzustände $\{|x\rangle\}$ sind im Allgemeinen kontinuierlich⁸. Wir bilden nun das unitäre Produkt mit einem Orts-Eigenzustand,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow \langle x|\psi\rangle = \psi(x) \in \mathbb{C} \\ \langle\psi| &\rightarrow \langle\psi|x\rangle = \psi^*(x). \end{aligned}$$

Die *Koordinatendarstellung des Zustandes* $|\psi\rangle$ ist also gerade die uns schon vertraute Wellenfunktion. Nun finden wir die Matrixdarstellung bzw. die Matrixelemente eines beliebigen Operators \hat{A} sowie von \hat{A}^\dagger .

Es seien $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ zwei beliebige Basiszustände sowie $\hat{A}|\psi_i\rangle = |\varphi_i\rangle$. In der Ortsdarstellung werden aus den Zuständen Funktionen, d.h. die Wirkung des Operators wird zu $\hat{A}\psi_i(x) = \varphi_i(x)$. Dann gilt für die Wirkung im dualen Raum $\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger = \langle\varphi_1|$ und – in der Ortsdarstellung: $\varphi_i^*(x) = [\hat{A}\psi_i(x)]^*$, und wir können die Matrixdarstellung der beiden Operatoren in die Koordinatendarstellung überführen (eine allgemeine Herleitung folgt später):

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle \rightarrow \int \psi_1^*(x) \hat{A}\psi_2(x) dx \quad (3.10)$$

$$\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger|\psi_2\rangle \rightarrow \int (\hat{A}\psi_1(x))^* \psi_2(x) dx \quad (3.11)$$

Für einen hermiteschen Operator müssen damit diese Ausdrücke übereinstimmen. Somit folgt:

Das Kriterium für selbstadjungierte Operatoren ist in Matrixdarstellung:

$$(3.10) = (3.11) \quad \forall \quad |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \iff \hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (3.12)$$

Prüfen wir nun–als Beispiel–, ob der Orts- und der Impulsoperator in der Ortsdarstellung selbstadjungiert sind.

- Für den Ortsoperator sehen wir leicht:

$$\int \psi_1^* x \psi_2 dx = \int (x\psi_1)^* \psi_2 dx.$$

Der Ortsoperator ist also selbstadjungiert.

- Prüfen wir dies nun für den Impulsoperator. Hierfür werden wir einmal partiell integrieren. Der Mischterm der partiellen Integration fällt dann wegen der Normierung im Unendlichen weg:

$$\begin{aligned} \langle\psi_1|\hat{p}_x|\psi_2\rangle &\rightarrow \int \psi_1^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_2 dx \\ &= \int \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1^* \right) \psi_2 dx \\ &= \int \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 \right)^* \psi_2 dx = \int (\hat{p}_x \psi_1)^* \cdot \psi_2 dx \end{aligned}$$

Da dies für beliebige Funktionen ψ_1 und ψ_2 gilt (beliebige Zustandsvektoren), folgt daraus $\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$. Analog funktioniert dies für den Vektoroperator $\hat{\underline{p}}$.

⁸Im Detail betrachten wir diesen Fall etwas später.

3.3 Mathematischer Einschub: Operatoren im Hilbertraum

Wir werden hier einige wichtige Definitionen, Sätze und Eigenschaften besprechen. Im wesentlichen ist dies eine Fortsetzung der Einführung vom vorigen Abschnitt. Zunächst definieren wir einige wichtige Operatoren.

1. Inverser Operator \hat{A}^{-1} :

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}$$

2. Adjungierter Operator \hat{A}^\dagger :

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi\rangle &= |\phi\rangle \in \mathcal{H} \\ \langle\psi|\hat{A}^\dagger &= \langle\phi| \in \tilde{\mathcal{H}}\end{aligned}$$

3. Selbstadjungierter Operator \hat{A} :

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

4. Unitärer Operator \hat{A} :

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{A}^\dagger &= \hat{1} \\ \hat{A}^\dagger &= \hat{A}^{-1}\end{aligned}$$

5. Projektionsoperator auf einen Zustand $|a\rangle$, \hat{P}_a :

$$\hat{P}_a = |a\rangle\langle a| \tag{3.13}$$

Dieser Operator ist wie folgt zu verstehen:

$$\hat{P}_a|\psi\rangle = |a\rangle\langle a|\psi\rangle$$

Wir verlangen noch $\langle a|a\rangle = 1$. Der Projektionsoperator hat folgende Eigenschaften:

- (a) Für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\hat{P}_a|\psi\rangle \in \mathcal{L}_a \subset \mathcal{H}$$

- (b) Außerdem gilt noch eine Eigenschaft, die man Idempotenz nennt:

$$\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$$

Dies können wir leicht zeigen:

$$\hat{P}_a^2 = (|a\rangle\langle a|)\underbrace{(|a\rangle\langle a|)}_{=1} = \hat{P}_a$$

- (c) Außerdem ist der Projektionsoperator selbstadjungiert:

$$\hat{P}_a^\dagger = \hat{P}_a$$

Die lässt sich ebenfalls leicht zeigen:

$$\hat{P}_a^\dagger = (|a\rangle\langle a|)^\dagger = \langle a|^\dagger \cdot |a\rangle^\dagger = |a\rangle\langle a|$$

Wichtige Eigenschaften von Operatoren im Hilbertraum

Satz 1: Für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und für alle Operatoren \hat{A} gilt

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^*$$

Beweis: Sei zunächst $\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ und $\langle \psi | \hat{A}^\dagger = \langle \varphi |$. Dann gilt $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle$ und $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle$. Benutzt man nun noch $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$, so hat man alles gezeigt.

Satz 2: Ein unitärer Operator lässt das unitäre Produkt invariant.

Beweis: Sei $|\Phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ und $\langle \Phi | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger$. Dann gilt für das unitäre Produkt:

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\hat{A}^\dagger \hat{A}}_{=1} | \psi \rangle$$

Die folgenden Sätze gelten für hermitesche Operatoren.

Satz 3: Hermitesche Operatoren besitzen einen reellen Erwartungswert. Es gilt also für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \left(\langle \hat{A} \rangle_\psi \right)^*$$

Beweis: Hier können wir Satz 1 wie folgt benutzen:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$

Satz 4: Ein hermitescher Operator \hat{A} mit $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ besitzt nur reelle Eigenwerte.

Beweis: Für alle Eigenvektoren $|a\rangle$ mit $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, folgt $\langle a | \hat{A} | a \rangle = a \langle a | a \rangle$, und aus $\langle a | \hat{A}^\dagger = \langle a | a^*$, folgt $\langle a | \hat{A}^\dagger | a \rangle = a^* \langle a | a \rangle$. Hier ist zu bemerken, dass Messresultate i.d.R. reell sein sollten. Hermitesche Operatoren bilden also eine adäquate Repräsentation physikalischer Observabler. Hierbei liefert die Messung den Eigenwert.

Satz 5: Sei \hat{A} ein Operator mit $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Dann sind die *Eigenvektoren* $|a\rangle$ und $|a'\rangle$ zu *verschiedenen Eigenwerten* a und a' *orthogonal*, d.h.

$$\langle a | a' \rangle = \delta_{a,a'}$$

Beweis: Zunächst gilt:

$$\begin{aligned} \langle a' | \hat{A} | a \rangle &= a \langle a' | a \rangle \\ \langle a' | \hat{A}^\dagger | a \rangle &= a' \langle a' | a \rangle \end{aligned}$$

Betrachte nun die Differenz. Aufgrund der vorigen Ergebnisse gilt dann:

$$\langle a' | \hat{A} | a \rangle - \langle a' | \hat{A}^\dagger | a \rangle = 0 = (a - a') \langle a' | a \rangle .$$

Hieraus folgt aber für $a \neq a'$ sofort $\langle a' | a \rangle = 0$.

Bemerkungen: Zu Satz 5 sind noch einige Bemerkungen zu machen. Es gibt auch den Fall “entarteter” Zustände, bei dem die s Eigenvektoren

$$|a_n^1\rangle, \dots, |a_n^s\rangle$$

zum selben Eigenwert a_n korrespondieren. Es gilt dann

$$\hat{A} |a_n^j\rangle = a_n |a_n^j\rangle$$

für $j = 1, \dots, s$. Man spricht von s -facher Entartung. Die $\{|a_n^j\rangle\}$ bilden dann einen s -dimensionalen Unterraum $\mathcal{H}_{a_n} \subset \mathcal{H}$. Das Problem ist nun, dass zwar die Eigenvektoren zu *verschiedenen* Eigenwerten orthogonal sind, aber die $\{|a_n^j\rangle\}$ im allgemeinen nicht untereinander orthogonal sind. Die Lösung ergibt sich durch die Konstruktion eines neuen orthogonalen Satzes von Eigenvektoren $\{|b_n^j\rangle\}$. Die neuen Eigenvektoren ergeben sich über eine unitäre Transformation U aus den alten Eigenvektoren. Für alle j gilt:

$$|b_n^j\rangle = U |a_n^j\rangle = \sum_{i=1}^s c_n^{ji} |a_n^i\rangle$$

Die gewünschte Eigenschaft $\langle b_n^i | b_n^j \rangle = \delta_{ij}$ legt die Transformation U fest. Ein Beispiel ist das Orthogonalisierungsverfahren von Gram-Schmidt. Anwendung findet dies z.B. bei den entarteten Energie-Niveaus im Wasserstoff-Atom, s. Abschnitt 5.4, oder auch im Rahmen der Störungstheorie für entartete Niveaus, s. Abschnitt 7.3.

3.4 Quantenmechanische Zustandsmessung und vollständige Observable

Wir stellen uns nun die Frage, welche Größen (Observable) zu messen sind, um einen quantenmechanischen Zustand eindeutig zu bestimmen. In der klassischen Mechanik wird der Zustand von N Teilchen bestimmt durch die Gesamtheit der Koordinaten und Impulse, $\{q_1, p_1, \dots, q_N, p_N\}$. Alle weiteren Größen wie etwa Energie oder Drehimpuls sind nun Funktionen von q und p . Ihre Messung liefert keine neuen Informationen. In der Quantenmechanik wird eine Observable A beschrieben durch einen Operator \hat{A} , und der Zustand ist bestimmt durch seine Zustandsvektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Die Messung von A im stationären Fall ist dann bestimmt durch das Eigenwertproblem von \hat{A} ,

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle,$$

wobei $i = 1, \dots, N$ diskret oder kontinuierlich sein kann. Die Eigenwerte a_i sind die möglichen Messwerte von A , und die Eigenvektoren $|a_i\rangle$ die zugehörigen Zustände des Systems nach der Messung.

Definition: Eine Observable A ist vollständig oder maximal, wenn der quantenmechanische Zustand des Systems eindeutig durch die Messung von A bestimmt ist.

Das heißt also, es existiert keine weitere Observable B deren gleichzeitige Messung mit A zusätzliche Informationen liefert. Die mathematische Bedeutung ist hier, dass die Eigenvektoren von \hat{A} , $\{|a_i\rangle\}$, die den Operator vollständig bestimmen⁹, eine Basis in \mathcal{H} bilden. Jeder Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist dann darstellbar als Linearkombination der $|a_i\rangle$. Für hermitesche Operatoren einer vollständigen Observable lässt sich ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) konstruieren,

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Eine Normierung auf 1 ist immer möglich durch eine entsprechende Skalierung der Zustände.

⁹Aufgabe: man begründe diese Aussage.

Beispiel: Wir betrachten ein quantenmechanisches 1-Teilchen System. Die Ortsmessung durch den Operator $\hat{q} = \{\hat{q}_x, \hat{q}_y, \hat{q}_z\}$ ist vollständig, was wir nach den Ergebnissen für ein Kastenpotential oder den Oszillator erwarten. Die Messung liefert die Vektoren \underline{q}_i .

$$\hat{q} |\underline{q}_i\rangle = \underline{q}_i |\underline{q}_i\rangle .$$

Die Impuls-Messung liefert dann keine zusätzlichen Informationen.

Praktisches Vorgehen: Sei nun $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand des Systems und A eine vollständige Observable. Die Messung von A im Zustand $|\psi\rangle$ liefert einen möglichen Messwert, also a_1 oder a_2 oder einen anderen. Dann bilden die zugehörigen Eigenzustände, $\{|a_i\rangle\}$, eine Basis in \mathcal{H} , die wir als Orthonormalbasis wählen. Die Entwicklung von $|\psi\rangle$ nach diesen Basisvektoren ist dann:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle .$$

Nun ist die Frage, wie man die Koeffizienten c_i bestimmt. Dazu bilden wir das unitäre Produkt mit einem bestimmten Eigenzustand $\langle a_j| \in \tilde{\mathcal{H}}$:

$$\langle a_j|\psi\rangle = \sum_i c_i \underbrace{\langle a_j|a_i\rangle}_{\delta_{ij}} = c_j ,$$

wodurch wir die Linearkombination von $|\psi\rangle$ umschreiben können als

$$|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle = \sum_i \hat{P}_i |\psi\rangle . \quad (3.14)$$

wobei wir die Definition (3.13) des Projektionsoperators auf den Zustand $|a_i\rangle$ verwendet haben. Die erste Gleichung (3.14) führt uns auf eine außerordentlich nützliche Darstellung des $\hat{1}$ -Operators:

$$\hat{1} = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \quad (3.15)$$

Dies ist also gleichzeitig eine kompakte Bedingung für die Vollständigkeit einer Basis.

Zusammenfassung: Der Zustand eines quantenmechanischen Systems ist bestimmt durch eine vollständige Observable A . Die möglichen Messwerte a_i sind die Eigenwerte von \hat{A} (man spricht auch vom Spektrum von \hat{A}). Die möglichen Zustände $|a_i\rangle$ sind die Eigenvektoren von \hat{A} . Die **Bedingung für ein VONS** ist:

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \quad (3.16)$$

$$\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \hat{1} \quad (3.17)$$

Einen beliebigen Zustand erhalten wir durch Superposition der Basis-Zustände. Hierbei sind die Entwicklungskoeffizienten $c_i = \langle a_i|\psi\rangle$ komplexe Zahlen. Sie bestimmen die Wahrscheinlichkeit, im Zustand $|\psi\rangle$ den Eigenwert a_i zu messen:

$$P_{|\psi\rangle \rightarrow |a_i\rangle} = |c_i|^2 = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \quad (3.18)$$

Wir fragen nun, wie diese Wahrscheinlichkeit experimentell bestimmt werden kann.