Quantenmechanik

Rainer Verch

Institut für Theoretische Physik
Universität Leipzig

Vorlesung 14

Eine Korrektur zur letzten Vorlesung. Im Diagramm auf der letzten Folie (Nr. 69) von VL 13 ist ein ärgerlicher Tippfehler aufgetreten:

Auf dem untersten Pfeil muss $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \widehat{\xi}_J(t) U_t^A \mathrm{d}t$ stehen. In der vorangegangenen Version von VL 13 stand jedoch $\xi_J(t)$ anstelle von $\widehat{\xi}_J(t)$ unter dem Integral ($\widehat{\xi}_j$ ist die Fouriertransformierte von ξ_J). In einer inzwischen aktualisierten Fassung von VL 13 ist dieser Fehler korrigiert.

2.8 Die Postulate der formalen Beschreibung quantenmechanischer Systeme

Wie schon bei der Bornschen Deutung angesprochen, sind bei der quantenmechanischen Beschreibung von Experimenten wesentlich 2 Teile zu unterscheiden:

- die Präparation = Herstellung eines Ensembles von Einzelsystemen (oder von jeweils n Einzelsystemen)
- die Messung = Statistik von Messungen physikalischer Größen an den Einzelsystemen

Ziel der formalen Beschreibung:
Berechnung von Wahrscheinlichkeiten für (ziemlich) beliebige Kombinationen von Präparation und Messung. Die Theorie muss danach enthalten:

- Größen zur Beschreibung der Präparierverfahren
- Größen zur Beschreibung der Messverfahren
- Eine Vorschrift zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für jede Kombination

Postulat 1

Jeder Sorte quantenmechanischer Systeme wird ein Hilbertraum $\mathcal{H}$ zugeordnet.

Quantenmechanische Systeme können sein: Einzelne (oder mehrere) Atome, Elektronen, Elementarteilchen, Photonen, aber auch "Freiheitsgrade" solcher Systeme, z.B. Spin-Einstellungen, oder Polarisationseinstellungen von Photonen, phononische Anregungen in Festkörpern oder Flüssigkeiten ("Quasiteilchen").

"Sorte" bezieht sich dabei auf den Typ der Systeme und hat zu tun mit Unterscheidbarkeit: Z.B. sind Elementarteilchen verschiedener Ladung oder verschiedener Masse unterscheidbar, also von verschiedener Sorte.

Zustände von Systemen unterschiedlicher Sorte sind nicht superponierbar. D.h. es gibt zum Beispiel zwischen Elektronen und Neutronen keine quantenmechanischen Interferenzeffekte.

Postulat 2

Wir hatten beider Diskussion der Schrödingergleichung und der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation bereits gesehen, dass Zustände ($\hat{=}$ Präparierverfahren) durch normierte Lösungen der Schrödingergleichung beschrieben werden. Im abstrakten Rahmen entsprechen den normierten Lösungen der Schrödingergleichung Vektoren ψ im Hilbertraum $\mathcal{H}$ die normiert sind, d.h. $||\psi|| = 1$. Wir hatten auch gesehen, dass die Rolle, die den normierten Hilbertraum-Vektoren ψ im Vergleich mit Experimenten zukommt, z.B. in der Diskussion des Doppelspalt-Experiments, darin besteht, Erwartungswerte zu bilden.

Wichtig sind die **Erwartungswertfunktionale** $A \mapsto \langle A \rangle_\psi = (\psi, A\psi) \quad (A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}))$, die von jedem normierten Hilbertraum-Vektor ψ induziert werden. Die Zustände sind also die Erwartungswertfunktionale.

Wie die Diskussion des Doppelspaltexperiments auch gezeigt hat, ist diese Definition von Zuständen bzw. Erwartungswertfunktionalen nicht allgemein genug, weil sie die Möglichkeit klassischer statistischer Gemischbildung nicht erfasst. Es sollen aber auch klassische statistische Mischungen von quantenmechanischen Zuständen wieder quantenmechanische Zustände sein. (Ansonsten wäre die quantenmechanische statistische Beschreibung von Experimenten weniger allgemein als eine klassische statistische Beschreibung.) Das bedeutet: Wenn z.B. $\psi_1, \dots, \psi_k$ endlich viele normierte Vektoren in $\mathcal{H}$ sind und wenn $\lambda_1, \dots, \lambda_k \geq 0$ mit $\sum_{j=1}^k \lambda_j = 1$ gilt, dann soll auch

$$A \mapsto \langle A \rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \langle A \rangle_{\psi_j} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\psi_j, A\psi_j)$$

ein Zustand, bzw. ein Erwartungswertfunktional sein.

Letztlich möchte man hier auch Grenzwerte $k \to \infty$ bilden, d.h. von endlichen Folgen $\underline{\psi} = \{\psi_1, \ldots, \psi_k\}$ und $\underline{\lambda} = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_k\}$ übergehen zu unendlichen Folgen, unter der Bedingung $\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j = 1$.

Dies führt auf die folgende Fassung von Postulat 2:

Die **Zustände** ($\hat{=}$ Präparierverfahren) eines quantenmechanischen Systems mit dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ entsprechen den **Erwartungswertfunktionalen** von der Form

$$A \mapsto \langle A \rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\psi_j, A\psi_j) \quad (A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}))$$

wobei $\underline{\psi} = \{\psi_j\}_{j=1,\ldots,k}$ eine (endliche oder unendliche) Folge von normierten Vektoren in $\mathcal{H}$ ist ($||\psi_j|| = 1$) und $\underline{\lambda} = \{\lambda_j\}_{j=1,\ldots,k}$ eine (endliche oder unendliche) Folge von nicht-negativen Zahlen ist mit $\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1$ (der Fall $k = \infty$ ist zugelassen).

Zustände dieser Art haben zwei wichtige Eigenschaften, die für die Wahrscheinlichkeitsinterpretation wesentlich sind:

- $\langle A^* A \rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} \geq 0 \quad (A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}))$
  "Wahrscheinlichkeiten sind stets nicht-negativ"

- $\langle \mathbf{1} \rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = 1$
  Normierung der Wahrscheinlichkeit: "Das sichere Ereignis tritt mit Wahrscheinlichkeit = 1 auf"

Wir kommen darauf in Kürze zurück.

Mathematisch wird der hier eingeführte Zustandsbegriff mit Hilfe von Spurklasse-Operatoren und der Spurbildung systematischer beschrieben. Die Einführung dieser Begriffe wird an eine später folgende Stelle verlegt, um die Diskussion der Postulate nicht zu sehr zu unterbrechen.

Postulat 3

Die **Observablen** ($\hat{=}$ Messverfahren) entsprechen den **selbstadjungierten Operatoren** $(A, D(A))$ in $\mathcal{H}$. Für jeden selbstadjungierten Operator $(A, D(A))$ mit projektorwertigem Spektralmaß P_A und jedem Zustand $\langle\,.\,\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ ist

$$\langle P_A(J)\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\psi_j, P_A(J)\psi_j)$$

die **Wahrscheinlichkeit, dass der Messwert der Observablen A bei der Messung am Zustand (Erwartungswertfunktional) $\langle\,.\,\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ in der Menge $J \subset \mathbb{R}$ liegt**, und

$$\langle A\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\psi_j, A\psi_j)$$

ist der **Erwartungswert** von A.

Bei unbeschränkten Operatoren $(A, D(A))$ kann der Erwartungswert nicht für beliebige Zustände gebildet werden – so wie für solche Operatoren nicht alle Hilbertraum-Vektoren im Definitionsbereich liegen. Wenn $\underline{\psi} = \{\psi_1, \ldots, \psi_k\}$ mit einer endlichen Folge von normierten Vektoren $\psi_j \in D(A)$, dann ist der Erwartungswert wohldefiniert.

Die Wahrscheinlichkeit $\langle P_A(J)\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ ist aber für jeden selbstadjungierten Operator $(A, D(A))$ und jeden Zustand $\langle\,.\,\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ wohldefiniert.

An dieser Stelle sollte sich die erhebliche Bedeutung des Satzes 2.7.4 in der mathematischen Beschreibung der Postulate der Quantenmechanik von selbst erschließen.

Postulat 4

Jeder Teilchensorte ist außerdem ein **Hamiltonoperator** H zugeordnet, ein selbstadjungierter Operator $(H, D(H))$ in $\mathcal{H}$, der die **Zeitentwicklung** des Systems durch seine unitäre Gruppe $\{U_t^H\}_{t\in\mathbb{R}}$ bestimmt, $U_t^H = e^{itH/\hbar}$, in folgender Weise:

Wenn $\langle A\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ der Erwartungswert der Observablen A im Zustand $\langle\,.\,\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ zu einer Zeit t_0 ist, dann ist für $t \in \mathbb{R}$

$$\langle U_t^H A (U_t^H)^{-1}\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\psi_j, U_t^H A (U_t^H)^{-1} \psi_j)$$

der Erwartungswert derselben Observablen (gleiches Messverfahren) im selben Zustand (gleiches Präparierverfahren) zur Zeit $t_0 + t$.

2.8.1 Bemerkungen, Erläuterungen, Ergänzungen zu den Postulaten

(A)

Ein Teil der Aussagen des Spektralsatzes 2.7.4 ist, dass für einen selbstadjungierten Operator $(A, D(A))$ im Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit projektorwertigem Spektralmaß P_A durch

$$\mu_A^\psi(J) = (\psi, P_A(J)\psi)$$

zu jedem normierten Vektor ψ in $\mathcal{H}$ ein Maß auf (den messbaren Teilmengen J von) $\mathrm{spec}(A)$ gehört. Jedes solche Maß kann in natürlicher Weise ausgedeht werden auf (die messbaren Teilmengen von) $\mathbb{R}$, in dem $\mu_A^\psi(J) = 0$ gesetzt wird wenn $J \cap \mathrm{spec}(A) = \emptyset$.

Jedes der Maße μ_A^ψ ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß, d.h. es gilt $\mu_A^\psi(\mathbb{R}) = 1$. Das ist hier der Fall wenn ein Zustand $\langle A \rangle_\psi = (\psi, A\psi)$ durch einen einzigen normierten Vektor ψ induziert wird (als Erwartungswertfunktional), aber es gilt auch für allgemeine Zustände:

$$\mu_A^{(\underline{\psi},\underline{\lambda})}(J) = \langle P_A(J) \rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$$

ist wieder ein Wahrscheinlichkeitmaß (auf den messbaren Teilmengen von $\mathbb{R}$).

Jedes dieser Wahrscheinlichkeitsmaße trägt nur etwas bei, wenn ein Anteil von $\mathrm{spec}(A)$ vorliegt; genauer:

$$\mu_A^{(\underline{\psi},\underline{\lambda})}(J) = 0 \quad \text{falls} \quad J \cap \mathrm{spec}(A) = \emptyset$$

Das bedeutet: **In jedem Zustand treten Messwerte der Observablen A, die nicht in** $\mathrm{spec}(A)$ **liegen, mit der Wahrscheinlichkeit $= 0$ auf.** Anders gesagt, nur Werte im Spektrum treten als Messwerte einer Observablen auf (im statistischen Sinn – dies ist keine Aussage über Einzelexperimente!).

Die zuvor erwähnten Eigenschaften von Erwartungswertfunktionalen,

$$\langle A^*A\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} \geq 0 \quad (A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})) \quad \text{und} \quad \langle \mathbf{1}\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = 1$$

sind gerade äquivalent zu der Aussage, dass für jede Observable $(A, D(A))$ die $\mu_A^{(\underline{\psi},\underline{\lambda})}(J) = \langle P_A(J)\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ Wahrscheinlichkeitsmaße sind. (Wobei das letztere A nichts zu tun hat mit dem A aus der Bedingung $\langle A^*A\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} \geq 0$. Manchmal sind die generischen Bezeichnungen mit der Gefahr der Verwechslung behaftet.)

Dies sollte die grundsätzliche Struktur der Quantenmechanik als eine *statistische Theorie* unterstreichen. In gewisser Weise können Teile der mathematischen Beschreibung der Quantenmechanik als eine verallgemeinerte Wahrscheinlichkeitstheorie aufgefasst werden.

(B)

Die Zeitentwicklung kann auf zwei äquivalente Arten gelesen werden.

(1) $\langle U_t^H A (U_t^H)^{-1}\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \langle A(t)\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}}$ mit $A(t) = U_t^H A (U_t^H)^{-1}$. Bei dieser Auffassung wird der Zustand bei $t = 0$ präpariert, aber die Observable wird erst zur Zeit $t + t_0$ gemessen (anstatt zur Zeit t_0). D.h. die Observable entwickelt sich mit der Zeit, der Zustand nicht. Diese Betrachtungsweise wird das **Heisenbergbild** der Zeitentwicklung genannt.

(2) $\langle U_t^H A (U_t^H)^{-1}\rangle_{\underline{\psi},\underline{\lambda}} = \langle A\rangle_{\underline{\psi}(t),\underline{\lambda}}$ mit $\underline{\psi}(t) = \{(U_t^H)^{-1}\psi_j\}_{j=1,\ldots,k}$. Weil $\{U_t^H\}_{t\in\mathbb{R}}$ eine unitäre Gruppe ist, gilt $(U_t^H)^{-1} = U_{-t}^H$. In dieser Auffassung wird die Observable A zur Zeit t_0 gemessen, aber der Zustand wurde bereits zur Zeit $-t$ (anstatt zur Zeit $t = 0$) präpariert. D.h. die Observable ändert sich nicht, aber der Zustand wird *rückwärts* in der Zeit entwickelt, was einem früheren Zeitpunkt der Präparation entspricht. (Siehe die Diskussion der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation.) Diese Betrachtungsweise wird das **Schrödingerbild** der Zeitentwicklung genannt.

Was hierbei beachtet werden sollte ist die Äquivalenz

$$\text{Schrödingerbild: präpariere früher} \quad \Longleftrightarrow \quad \text{messe später: Heisenbergbild}$$