3. Allgemeiner Formalismus der QM

Schrödinger-Gleichung hat bisher gut funktioniert.
→ kann jedoch nicht die ganze Wahrheit darstellen
(z.B. ist kein Platz für Information über Teilchen-Spin)

Strategie: um Verallgemeinerungen zu ermöglichen, wollen wir die wesentliche Struktur in kompakter Form abstrahieren.

3.1 Zustände / Observablen / Erwartungswerte

Physikalische Objekte (Teilchen, Wellen, ..) werden als Zustände betrachtet.
Dirac-Notation: $|\psi\rangle$ ("ket-Vektor").
Die Zustände bilden einen komplexen Vektorraum V (Superposition):

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

Zu jedem $|\psi\rangle$ gibt es einen "konjugierten" Vektor $\langle\psi|$ ("bra-Vektor");
diese bilden einen "dualen" Vektorraum V^*.

Es sei ein komplexwertiges Skalarprodukt definiert, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ ("bracket"),
mit den folgenden Eigenschaften:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$$

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

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

$\langle\psi|\psi\rangle \equiv \|\psi\|^2 \geq 0$, man nennt $\|\psi\|$ die Norm von ψ

$\|\psi\| = 0 \iff |\psi\rangle = |0\rangle$, "Nullvektor"; $|0\rangle = 0\cdot|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle - |\psi_1\rangle$

Falls $\|\psi\| < \infty \ \forall |\psi\rangle \in V$ ist V ein Hilbert-Raum.
→ dies wird im Folgenden angenommen.
→ Streuzustände müssen dann regularisiert werden,
z.B. durch ein endliches Volumen (vgl. Ü 17)

Es wird postuliert, dass $|\psi\rangle$ und $\alpha|\psi\rangle$ $(\alpha\in\mathbb{C})$ dieselbe physikalische Information enthalten.

→ können uns auf normierte Zustände beschränken, $\|\psi\|=1$

Sei $\hat{A}$ nun ein linearer Operator bzw. Abbildung $\hat{A}: V\to V$:

$$\hat{A}\left[\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle\right]=\alpha\hat{A}|\psi_1\rangle+\beta\hat{A}|\psi_2\rangle .$$

Die Eigenzustände von $\hat{A}$ sind $|a\rangle$, also $\hat{A}|a\rangle=a|a\rangle$, $a\in\mathbb{C}$.
Physikalische Größen (Energie, Impuls, Drehimpuls, Ort, ...) werden durch solche Operatoren dargestellt; insbesondere sollten dann alle möglichen Messwerte a reell sein; einen solchen Operator nennt man Observable.

- Wellenfkt in a-Darstellung: $\psi(a)\equiv\langle a|\psi\rangle$
- z.B. $\hat{A}=\hat{x}$ $\Rightarrow$ $\psi(x)\equiv\langle x|\psi\rangle$
- Wahrscheinlichkeit für den Eigenwert a im Zustand $|\psi\rangle$: $P_\psi(a)\equiv|\langle a|\psi\rangle|^2$

Orthonormierung: $\langle a'|a\rangle=\delta_{a'a}$

Vollständigkeit: $1=\sum_a P_\psi(a)=\sum_a\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle=\langle\psi|\left(\sum_a|a\rangle\langle a|\right)|\psi\rangle\quad\forall|\psi\rangle$

$$\Rightarrow\sum_a|a\rangle\langle a|=\hat{\mathbb{1}}=\text{Einheitsoperator},\quad\text{mit } \hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle=|\psi\rangle\quad\forall|\psi\rangle$$

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

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

haben also eine Spektraldarstellung für $\hat{A}$: $\hat{A}=\sum_a|a\rangle a\langle a|$

((oder so: $\hat{A}=\hat{A}\hat{\mathbb{1}}=\hat{A}\sum_a|a\rangle\langle a|=\sum_a a|a\rangle\langle a|=\sum_a|a\rangle a\langle a|$))

wann ist der Operator $\hat{A}$ eine Observable?

Def den zu $\hat{A}$ adjungierten Operator $\hat{A}^+$: $\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle=\langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle\quad\forall|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle$

$\hat{A}^+$ in Spektraldarstellung?

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

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

physikalische Observablen haben reelle EW a

$\Rightarrow \hat{A}^+ = \hat{A}$ ("selbstadjungiert")

$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ ("hermitesch")

((Physiker nennen meist $\hat{A}^+ = \hat{A}$ schon "hermitesch"))

Basiswechsel: Sei $\hat{B}$ eine weitere Observable

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

$\Rightarrow \psi(a) = \langle a|\psi\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle\langle b|\psi\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle \psi(b)$ "Übergangsamplitude"

$\psi(b) = \sum_a \langle b|a\rangle \psi(a)$

$\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}} = \sum_{b,b'} |b\rangle \underbrace{\langle b|\hat{A}|b'\rangle}_{\equiv A_{bb'}} \langle b'|$; Matrixelemente von $\hat{A}$ in Eigenbasis von $\hat{B}$

für ein kontinuierliches Spektrum gelten die Verallgemeinerungen:

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

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

$$\langle a|a'\rangle = \begin{cases} \delta_{aa'} & \text{(diskret)} \\ \delta(a-a') & \text{(kontinuierlich)} \end{cases}$$ ((falls nicht regularisiert))

→ Postulate der QM ((mehr Postulate später))

(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.

Wir haben in diesem Abschnitt eigentlich nur eine neue Notation für bekannte mathematische Strukturen der Linearen Algebra eingeführt (Tabelle: s. nächste Seite).

Wichtiger Unterschied: Vektoren in der QM können auch unendlich dimensional (d.h. Funktionen) sein!