3. Formalismus der Quantenmechanik

Quantenmechanische Zustände werden durch Wellenfunktionen beschrieben.

Born: $|\psi(\vec{x},t)|^2 \, d^3x$ Wahrscheinlichkeit Teilchen im infinitesimalen Volumen d^3x um Punkt $\vec{x}$ zur Zeit t zu finden

Wahrscheinlichkeitsinterpretation führt auf Normierbarkeit als notwendiges Kriterium für q.m. Zustände ψ

Superpositionsprinzip: Quantenmechanische Zustände können aus der Überlagerung einzelner Zustände entstehen. Diese müssen wiederum der Born'schen Interpretation genügen.

Wellenfunktionen sind Elemente eines (abzählbar unendlich-dim.) Vektorraums $L^2(\mathbb{R}^3)$.

(linearer Vektorraum der quadratintegrablen Funktionen — Hilbertraum)

Ziel: Entwickle mathematischen Formalismus für verallgemeinerten Zustandsbegriff.

3.1 Darstellungen der Quantenmechanik

Wir kennen bereits die Orts- und Impulsdarstellungen der Wellenfunktion (Abschnitt 1.5):

$$\psi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \tilde{\varphi}(\vec{k},t)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \tilde{\varphi}(\vec{p},t)\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

$$\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = \int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, \psi(\vec{x},t)\, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

Operatoren:

	Ortsop.	Impulsop.
Ortsdarst.:	$\hat{\vec{x}} = \vec{x}$	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$
Impulsdarst.:	$\hat{\vec{x}} = -\frac{1}{i}\vec{\nabla}_k = -\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_p$	$\hat{\vec{p}} = \vec{p}$

Entwicklung quantenmechanischer Zustände nach orthonormierten Eigenfunktionen.

Abschnitt 2.4: System $\{\varphi_n\}$ von orthonormierten Funktionen vollständig: jede quadratintegrable Funktion kann nach φ_n entwickelt werden

$\{\varphi_n\}$ bilden eine Basis des Raumes $L^2(\mathbb{R}^3)$

Beispiel: Energieeigenfunktionen des harm. Oszillators.

$$\phi_n(u) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\, \pi^{1/2}}} H_n(u)\, e^{-u^2/2}$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \qquad n \in \mathbb{N}_0$$ mögliche Werte der Energie

Die Wellenfunktion $\psi_\alpha(\vec{x},t)$ bezeichne den quantenmechanischen Zustand eines physikalischen Systems, charakterisiert durch Quantenzahl α (z.B. Energiequantenzahl)

Sei A Observable mit

$$A\, \varphi_n(\vec{x}) = \lambda_n\, \varphi_n(\vec{x})$$

$\{\varphi_n\}$: vollständig und auf 1 normiert.

Entwicklung von $\psi_\alpha(\vec{x},t)$ nach $\varphi_n(\vec{x})$:

$$\psi_\alpha(\vec{x},t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(\alpha)}(t)\, \varphi_n(\vec{x})$$

Die $c_n^{(\alpha)}(t)$ sind gegeben durch:

$$c_n^{(\alpha)}(t) = \int d^3x\; \varphi_n^*(\vec{x})\, \psi_\alpha(\vec{x},t) \qquad \text{(Abschnitt 2.4)}$$

$$\psi_\alpha(\vec{x},t) = \int d^3x' \; \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') \; \psi_\alpha(\vec{x}',t)$$

$$\underset{\text{Vollst.}}{=} \int d^3x' \sum_n \varphi_n^*(\vec{x}') \, \varphi_n(\vec{x}) \; \psi_\alpha(\vec{x}',t)$$

$$= \sum_n \underbrace{\left(\int d^3x' \; \varphi_n^*(\vec{x}') \, \psi_\alpha(\vec{x}',t) \right)}_{c_n^{(\alpha)}(t)} \varphi_n(\vec{x})$$

Normierbarkeit liefert:

$$\int d^3x \; |\psi_\alpha(\vec{x},t)|^2 = \int d^3x \sum_{n,m} c_n^{*(\alpha)}(t) \varphi_n^*(\vec{x}) \; c_m^{(\alpha)}(t) \, \varphi_m(\vec{x})$$

$$= \sum_{n,m} c_n^{*(\alpha)}(t) \; c_m^{(\alpha)}(t) \underbrace{\int d^3x \; \varphi_n^*(\vec{x}) \, \varphi_m(\vec{x})}_{=\delta_{nm}}$$

$$= \sum_n |c_n^{(\alpha)}(t)|^2 \overset{!}{=} 1$$

$|c_n^{(\alpha)}(t)|^2$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Observable A an dem durch ψ_α beschriebenen Zustand den Eigenwert λ_n zu finden.

$\rightarrow$ Die Größen $\psi_\alpha(\vec{x},t)$, $\tilde{\psi}_\alpha(\vec{p},t)$, $\{c_n^{(\alpha)}(t)\}$ liefern völlig äquivalente Beschreibungen des q.m. Zustandes

"Um Zustand zu charakterisieren, kann ich mir aussuchen, ob $\psi_\alpha(\vec{x},t)$, $\tilde{\psi}_\alpha(\vec{p},t)$, $c_n^{(\alpha)}(t)$ verwendet werden soll"

→ kann Zustandsbegriff von der speziellen, gewählten Darstellung abstrahieren.
Für ein gegebenes Problem kann man die dafür angemessene Darstellung wählen.

3.2 Dirac'sche "Bracket" Schreibweise

Verallgemeinerte, darstellungsunabhängige Schreibweise

Physikalischer Zustand als Vektor in einem linearen Vektorraum über $\mathbb{C}$

Physikalischer Inhalt : Quantenzahl α

$$|\alpha\rangle \doteq \psi_\alpha(\vec{x},t),\quad \tilde{\psi}_\alpha(\vec{p},t),\quad \{c_n^{(\alpha)}(t)\},\dots$$

"ket"

Skalarprodukt:

$$(\psi_\beta, \psi_\alpha) = \int d^3x\; \psi_\beta^*(\vec{x},t)\,\psi_\alpha(\vec{x},t) \doteq \langle\beta|\alpha\rangle$$

$$|\alpha\rangle \doteq \psi_\alpha(\vec{x},t) \qquad \text{ket}$$

$$\langle\beta| \doteq \int d^3x\; \psi_\beta^*(\vec{x},t)\; \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Leerstelle}}}{\circ} \qquad \text{"bra"} \qquad \begin{pmatrix}\text{Integral-}\\ \text{operator}\end{pmatrix}$$