Kapitel 8

Zur Struktur der Quantenmechanik

8.1 Der quantenmechanische Hilbert–Raum

Linearer Zustandsraum
Die quantenmechanischen Zustände (z.B. $\psi(\vec{x},t)$ für 1 Teilchen) bilden einen *linearen Raum.*

- Sind ψ_1 und ψ_2 physikalisch realisierbare Zustände, so ist es auch

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2, \qquad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathcal{C}$$

  (Superpositionsprinzip).

- Das Superpositionsprinzip gilt nur für Teilchen mit gleichen Quantenzahlen: Zustände von Teilchen mit verschiedenen elektrischen Ladungen (z.B. Proton und Neutron) und von Teilchen mit ganzzahligem und halbzahligem Spin sind nicht superponierbar.

Skalarprodukt
Im Raum der Zustände ist durch

$$(\psi_2, \psi_1) \;=\; \int d^3\vec{x}\;\psi_2^*(\vec{x},t)\,\psi_1(\vec{x},t), \qquad (\psi,\psi) \;>\; 0\;,$$

ein *Skalarprodukt* definiert. Es ist

- antilinear im ersten Argument $\quad (\lambda\psi_1, \psi_2) = \lambda^*(\psi_1, \psi_2)$,
- linear im zweiten Argument, $\quad (\psi_1, \lambda\psi_2) = \lambda(\psi_1, \psi_2)$
- hermitisch $\quad (\psi_2, \psi_1) = (\psi_1, \psi_2)^*$
- positiv definit $\quad (\psi,\psi) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \psi = 0.$

Norm
Mathematisch wird der Raum der Zustände durch das Skalarprodukt (ψ_1, ψ_2) zu einem *normierten Raum*, mit der Definition der

- Norm: $\quad \|\psi\| \;\equiv\; +\sqrt{(\psi,\psi)}.$

Meistens schreiben wir für die Norm $\|\psi\|$ von ψ auch einfach $|\psi|$.

Konvergenz von Folgen
Euklidischen kann man mittels der Norm die *Konvergenz* einer Folge $\{\psi_n,\, n = 1,\ldots\}$ definieren:

$$\{\psi_n,\, n=1,\ldots\} \qquad \text{konvergent gegen } \psi\text{, falls} \qquad \lim_{n\to\infty} \|\psi_n - \psi\| \;=\; 0 \;.$$

Cauchy Folgen
Die Folge $\{\psi_n,\, n=1,\ldots\}$ heißt *Cauchy–Folge*, falls für beliebiges $\epsilon > 0$ ein $N(\epsilon)$ existiert, so daß

$$\|\psi_{n_1} - \psi_{n_2}\| < \epsilon \;, \quad \text{für } n_1, n_2 > N(\epsilon) \;\; .$$

Vollständige Räume
Falls zu jeder Cauchy–Folge im Raum ein Grenzelement gehört (wie im $\mathbb{R}^n$!), so heißt der Raum *vollständig*.

Der Raum der stetigen Funktionen ist nicht vollständig. Jedoch kann man zeigen (Riesz–Fischer), daß der Raum der quadratintegrablen Funktionen vollständig ist.

Hilbert-Raum
Ein Vektorraum mit Skalarprodukt, der vollständig ist, heißt *Hilbert–Raum* $\mathcal{H}$.

Dichte Untermengen
Eine Untermenge des Hilbert–Raumes heißt *dicht* in $\mathcal{H}$, falls die Menge aller Grenzelemente $\mathcal{H}$ selbst ist.

Separable Hilbert-Räume
Gibt es abzählbare Untermengen, die dicht sind, so heißt $\mathcal{H}$ *separabel.*

Die quantenmechanischen Hilbert–Räume sind separabel.

8.1.1 Operatoren

Selbstadjungierte Operatoren
Ein *selbstadjungierter Operator*

$$\mathbf{a}^\dagger \;=\; \mathbf{a}, \qquad (\mathbf{a}^\dagger\psi_1,\psi_2) \;=\; (\psi_1,\mathbf{a}\psi_2), \qquad \forall\psi_1,\psi_2 \in \mathcal{H},$$

hat reelle Eigenwerte (s. Kap. 4.2.2).

Postulat
Den physikalischen Größen wie Ort, Impuls, Drehimpuls, Energie etc. entsprechen selbstadjungierte Operatoren im Hilbert-Raum, und die Eigenwerte der der Operatoren bilden das "Spektrum" der möglichen Meßwerte.

Diskrete Spektren

Bei endlich–dimensionalen Matrizen (wie z.B. beim Drehimpuls) ist das Spektrum "diskret" , d.h. es gibt nur endlich viele verschiedene Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren liegen im Hilbertraum.

Kontinuierliche Spektren

Bei Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum sind die Eigenfunktionen nicht quadratintegrable und gehören damit im eigentlichen Sinne nicht zum Hilbertraum.

Wie z.B. die Impulsoperatoren

$$\mathbf{P}_j \;=\; \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx_j}, \qquad j=1,2,3, \qquad e_p(\vec{x}) \;=\; \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\,.$$

Mathematisch läss sich das Problem der nicht-Integrabilät durch einen Grenzwert-Betrachtung lösen. Man betrachtet erst das Physikalische System in einem endlichen Volumen V, mit integrablen Eigenfunktionen

$$e_p(\vec{x}) \;=\; \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}\,,$$

und lässt dann das Volumen $V\to\infty$ nach unendlich gehen. Diese Vorgehensweise wird in der Festkörperphysik eingehend diskutiert.

Hilbertraum-Basis

In der Quantenmechanik sucht man im Allgemeinen eine *orthogonale Basis* für den Hilbertraum welche der physikalischen Problemstellung angepasst ist, also den relevanten Obbservablen.

Nicht-entartete Eigenfunktionen

Wir gehen von einem selbstadjungierter Operator $\mathbf{A}_1$

$$\mathbf{A}_1 u_{j_1} \;=\; a_j(1) u_{j_1}, \qquad a_j(1)\in\mathbb{R}$$

aus. Sind die Eigenwerte nicht entartet, d. h. gehört zu jedem $a_{j_1}(1)$, $j_1=1,2,\ldots$, genau ein eindimensionaler Eigenvektorraum mit Eigenfunktion u_{j_1}, so ist man fertig:

Die Eigenfunktionen u_{j_1} bilden eine orthogonale Basis.

Entartete Eigenfunktionen

Im allgemeinen werden die Eigenwerte jedoch entartet sein. Dann sucht man einen zweiten, physikalisch relevanten, Operator $\mathbf{A}_2$, der mit $\mathbf{A}_1$ kommutiert,

$$\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1 \;=\; \mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\,.$$

Man kann dann die Eigenvektoren von $\mathbf{A}_2$ so wählen, daß sie gleichzeitig Eigenvektoren von $\mathbf{A}_1$ sind (s. Kap. 5.2.1):

$$\mathbf{A}_2 u_{j_1} \;=\; a_{j_2}(2) u_{j_1}\,.$$

Im allgemeinen werden zu einem j_1 verschiedene $a_{j_2}(2)$ gehören, mit Eigenvektoren $u_{j_1j_2}$, d.h. die ursprüngliche Entartung wird reduziert.

Vollständiger Satz von kommutierenden Observablen

Man setzt das Verfahren so lang fort, bis man einen Satz $(\mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_g)$ von selbstadjungierten Operatoren $\mathbf{A}_\gamma$, $\gamma = 1, \ldots, g$, mit folgenden Eigenschaften hat:
Je zwei der $\mathbf{A}_\gamma$ kommutieren miteinander. Die $\mathbf{A}_\gamma$ haben die Eigenwerte $a_{j_\gamma}(\gamma)$ und die gemeinsamen Eigenvektoren u_j, $j = (j_1, \ldots, j_\gamma, \ldots, j_g)$, wobei die u_j jeweils für festes j einen 1–dimensionalen Vektorraum aufspannen.

Verschiedene u_j sind zueinander orthogonal und die u_j bilden ein *vollständiges System*, d.h. jedes $\psi \in \mathcal{H}$ läßt sich nach den u_j entwickeln:

$$\psi \;=\; \sum_j c_j u_j, \qquad c_j = (u_j, \psi)\ ,$$

wobei $j = (j_1, \ldots, j_g)$ ein Multi–Index ist.

Man nennt die $\{\mathbf{A}_\gamma\}$ einen *vollständigen Satz von kommutierenden Observablen.* Für das Wasserstoff-Atom hatten wir mit

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{H}\ , \quad \mathbf{A}_2 = \vec{\mathbf{L}}^{\,2}\ , \quad \mathbf{A}_3 = \mathbf{L}_3\ , \quad \mathbf{A}_4 = \mathbf{S}_3$$

einen vollständigen Satz kommutierender Variablen gefunden.

Unterräume

Sei $M \subset \mathcal{H}$ ein Unterraum des Hilbertraumes $\mathcal{H}$ und $M_\perp$ das orthogonale Komplement von M,

$$(\psi_M, \psi_{M_\perp}) \;=\; 0, \qquad \forall \psi_M \in M, \qquad \forall \psi_{M_\perp} \in M_\perp\ .$$

Wie M ist auch $M_\perp$ ein Unterraum von $\mathcal{H}$, d.h. ein separabler Hilbertraum, d.h. abgeschlossen und vollständig.

Jeder Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ läßt sich eindeutig in zwei Komponenten ψ_M und $\psi_{M_\perp}$ zerlegen:

$$\psi \;=\; \psi_M + \psi_{M_\perp}, \qquad \psi_M \in M, \qquad \psi_{M_\perp} \in M_\perp\ .$$

Projektionsoperatoren

Der *Projektionsoperator* $\mathbf{P}_M$ auf den Unterraum M wird via

$$\mathbf{P}_M \psi \;=\; \psi_M \qquad \forall \psi \in \mathcal{H}$$

definiert. Somit gilt

$$\mathbf{P}^2 \psi \;=\; \mathbf{P}\mathbf{P}\psi \;=\; \mathbf{P}\psi_M \;=\; \psi_M, \qquad \mathbf{P}\psi_{M_\perp} \;=\; 0\ .$$

Umgekehrt projeziert $\mathbf{1} - \mathbf{P}_M$ auf $M_\perp$. Projektionsoperatoren $\mathbf{P}$ haben folgende Eigenschaften:

Idempotent $\quad \mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$

Selbstadjungiert $\quad \mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P}$

Seien ψ_1, ψ_2 beliebig, dann gilt

$$(\psi_2, \mathbf{P}_M \psi_1) \;=\; (\psi_{2M} + \psi_{2M_\perp}, \psi_{1M}) \;=\; (\psi_{2M}, \psi_{1M}) \;=\; (\mathbf{P}_M \psi_2, \psi_1)\ .$$

Die Eigenwerte sind 1 und 0

Sei $\mathbf{P}\psi = \lambda\psi$, dann ist

$$\mathbf{P}^2\psi \;=\; \lambda^2\psi \;=\; \mathbf{P}\psi \;=\; \lambda\psi, \qquad \lambda^2 \;=\; \lambda, \qquad \lambda \;=\; 1,0\;,$$

da $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$. Die Eigenvektoren zu $\lambda = 1$ sind die Elemente von M, die zu $\lambda = 0$ die in $M_\perp$.

Kommutierende Projektionsoperatoren

Zwei Projektionsoperatoren auf die Unterräume M_1 und M_2, $\mathbf{P}_1$ und $\mathbf{P}_2$, kommutieren i.A. nicht.

Falls M_1 orthogonal zu M_2 ist, dann hat man jedoch

$$\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2 \;=\; \mathbf{P}_2\mathbf{P}_1 \;=\; 0\;.$$

Endlicher Vektorraum

Als Beispiel betrachten wir mit $\mathcal{H}$ einen n–dimensionaler Vektorraum. A sei eine hermitesche Matrix mit nicht entarteten Eigenwerten a_j und Eigenvektoren

$$u_j \;=\; \begin{pmatrix} c_1(j) \\ \vdots \\ c_n(j) \end{pmatrix}\,, \qquad c_i(j)\;:\;\text{komplex.}$$

Das Skalarprodukt ist

$$\begin{aligned} u_j^+ u_k \;&=\; \Big(c_1^*(j),\ldots c_n^*(j)\Big)\begin{pmatrix} c_1(k) \\ \vdots \\ c_n(k) \end{pmatrix} \\ &=\; \sum_j c_i^*(j)c_i(k) \;=\; \delta_{jk}\,. \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\boxed{\begin{aligned} \begin{matrix}\mathbf{P}_j = u_j\,u_j^+ \\ \text{(keine Summation über } j)\end{matrix} \;&=\; \begin{pmatrix} c_1(j) \\ \vdots \\ c_n(j) \end{pmatrix}\Big(c_1^*(j),\ldots c_n^*(j)\Big) \\ &\equiv\; \begin{pmatrix} c_1(j)c_1^*(j) & \cdots & c_1(j)c_n^*(j) \\ \vdots & & \vdots \\ c_n(j)c_1^*(j) & \cdots & c_n(j)c_n^*(j) \end{pmatrix}\,, \\ \text{da } \mathbf{P}_j\,u_k = (u_j u_j^+)\;u_k \;&=\; u_j\,(u_j^+ u_k) = \delta_{jk}u_j\,. \end{aligned}}$$

Ferner

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_j\mathbf{P}_k &= u_j\,u_j^+ \cdot u_k\,u_k^+ = u_k\delta_{jk}u_k^+ = \delta_{jk}u_ju_j^+ \\ &= \delta_{jk}\mathbf{P}_j \quad .\end{aligned}$$

Ist a_j entartet, mit zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren
$u_{j,s}$, $s = 1, \ldots, m_j$, dann lautet der Projektionsoperator auf den Eigenvektorraum

$$\boxed{\mathbf{P}_j = \sum_{s=1}^{m} u_{js} \cdot u_{js}^+ \quad .}$$

8.1.2 Spektraldarstellung

Es sei $\mathbf{A}$ ein selbstadjungierter Operator mit den Eigenwerten a_j — diese können entartet sein — und zugehörigen Eigenvektoren u_j, die einen Unterraum M_j aufspannen.

Es seien $\mathbf{P}_j$ die Projektionsoperatoren auf die Unterräume M_j. Dann gilt

$$\boxed{\begin{aligned}\mathbf{P}_j\mathbf{P}_k &= \mathbf{P}_k\mathbf{P}_j = \delta_{jk}\mathbf{P}_j\ ; \qquad \sum \mathbf{P}_j = \mathbf{1} \\ \mathbf{A} &= \sum_j a_j\,\mathbf{P}_j\ :\ \ \text{Spektraldarstellung von } \mathbf{A}. \\ \mathbf{A}u_j &= a_ju_j\end{aligned}}$$

Operatorfunktionen

Eine *Funktion des Operators* $\mathbf{A}$ wird durch

$$\boxed{f(\mathbf{A}) \ = \ \sum_j f(a_j)\,\mathbf{P}_j}$$

definiert.

Erwartungswerte

Ist ein System im Zustand ψ, so hat man für den Erwartungswert $<\mathbf{A}>_\psi$ der Observablen $\mathbf{A}$:

$$<\mathbf{A}>_\psi \ = \ (\psi, \mathbf{A}\psi)\,.$$

Wir entwicklen ψ nach Eigenfunktionen von $\mathbf{A}$ und bezeichnen mit u_{js}, $s = 1, \ldots, m_j$, die orthonormierten Eigenvektoren von $\mathbf{A}$ zum Eigenwert a_j:

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_{j,s} c_{j,s}u_{js}, \qquad c_{j,s} = (u_{js}, \psi), \qquad \mathbf{A}u_{js} \ = \ a_ju_{js} \\ (\psi, \mathbf{A}\psi) &= \sum_j a_jw(a_j, \psi), \qquad w(a_j, \psi) \ = \ \sum_{s=1}^{m_j} |(u_{js}, \psi)|^2 \ .\end{aligned}$$

Man kann die Übergangswahrscheinlichkeit $w(a_j, \psi)$ auch mittels der Projektionsoperatoren darstellen. Aus

$$\mathbf{P}_k \psi \;=\; \sum_s c_{k,s} u_{k,s}$$

folgt

$$\boxed{w(a_j, \psi) \;=\; (\psi, \mathbf{P}_j \psi)\,.}$$

8.1.3 Die Dirac'sche Notation

Die Spektraldarstellung

$$\begin{array}{rclrclrcl} \mathbf{A} u_j & = & a_j u_j & u_j^+ u_k & = & \delta_{jk} & u_j u_j^+ & = & \mathbf{P}_j \\ \mathbf{A} & = & \sum a_j \mathbf{P}_j & \sum \mathbf{P}_j & = & \mathbf{1}\ , & & & \end{array}$$

gilt für alle selbstadjungierten Operatoren, auch für solche mit kontinuierlichem Spektrum.

Dirac hat in diesem Zusammenhang eine *formale Schreibweise* entwickelt, die diesem nichttrivialen Sachverhalt Rechnung tragen soll:

$$\begin{array}{rclrcl} u_j & \equiv & |a_j> & u_j^+ & \equiv & <a_j| \\ u_j^+ u_k & \equiv & <a_j|a_k> & u_j \cdot u_j^+ & = & |a_j><a_j| \\ \mathbf{A} & = & \sum a_j |a_j><a_j| & \sum |a_j><a_j| & = & \mathbf{1} \\ (\psi, \mathbf{A}\psi) & = & <\psi|\mathbf{A}|\psi> \ . & & & \end{array}$$

$<a_j|$ ("bra") ist der zu $|a_j>$ ("ket") "duale" Vektor, $<a_j|a_j>$ wird mit "bracket" bezeichnet.

Für diskrete (orthonormale) Eigenwerte a_j gilt $<a_i|a_j>= \delta_{i,j}$, bei kontinuierlichen Eigenwerten a und a' von $\mathbf{A}$ normiert zu

$$<a'|a> = \;\delta(a'-a)\ ,$$

$$\mathbf{A} \;=\; \underbrace{\int da\; a\,|a><a|}_{\text{kontinuierliches Spektrum}} \;+\; \underbrace{\sum_j a_j\,|a_j><a_j|}_{\text{diskretes Spektrum}} \quad .$$

<u>**Ortsdarstellung**</u>

Wir betrachten den (1-dimensioalen) Ortsoperator $\mathbf{Q}$:

$$\boxed{\begin{array}{rclcrcl} \mathbf{Q}|x> & = & x|x> \ , & & \mathbf{Q} & = & \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; x|x><x|\ , \\ <x'|x> & = & \delta(x'-x)\ , & & & & \\ <x'|\mathbf{Q}|x> & = & x\delta(x'-x)\,. & & & & \end{array}}$$

Die Entwicklung eines Zustandes $|\psi>$ sieht dann so aus:

$$\begin{array}{rcl} |\psi> & = & \int dx\,\psi(x)|x> \quad . \\ <x'|\psi> & = & \int dx\,\psi(x) <x'|x> = \;\psi(x')\ . \end{array}$$

Die Wellenfunktione $\psi(x) =< x|\psi >$ entsprich also der *Orts-Darstellung* von ψ. Man spricht auch von der *Schrödinger–Darstellung* des Zustandes $|\psi >$.

Impulsdarstellung

Für jeden Zustand $|p>$ gilt

$$|p> = \left(\int dx' \, |x'><x'|\right) |p> = \int dx' \ <x'|p> |x'> \ .$$

Sei nun $|p>$ Eigenvektor des Impulsopertators $\mathbf{P}$. Es gilt

$$<x|P|p> = \ p<x|p>, \qquad \mathbf{P}\psi(x) \ = \ \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x), \qquad <x|p> = \ c\, e^{ixp/\hbar} \ .$$

Die Normierungskonstante bestimmt man mit Hilfe von $\int dp\, |p><p| = \mathbf{1}$ aus

$$\delta(x-x') \ =<x|x'>= \int dp \ <x|p><p|x'> = \ |c|^2 \int dp \ e^{i\,p(x\,-\,x')/\hbar} \ = \ |c|^2 2\pi\hbar\, \delta(x-x'),$$

mit: $c = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$. Somit haben wir

$$\boxed{<x|p> = \ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\,x\,\cdot\,p/\hbar} \, .}$$

Entwickelt man die Basisvektoren $|p>$ nach den Basisvektoren $|x>$, so sind die ebenen Wellen $<x|p>$ die Entwicklungskoeffizienten.

Energiedarstellung

Die Basisvektoren $|E>$, die Eigenvektoren von $\mathbf{H}$, lassen sich als Linearkombination der $|x>$ darstellen, mit $<x|E>= u_E(x)$ als Entwicklungskoeffizienten:

$$|E> = \int dx <x|E> |x> = \int dx \ u_E(x)|x>$$

Die $u_E(x)$ sind die Matrix–Elemente einer unitären Transformation von der Basis $\{|x>\}$ zu der Basis $\{|E>\}$, denn aus $<x'|x>= \delta(x'-x)$ folgt

$$\begin{aligned} <E'|E> \ &= \int dx'\, dx\, u^*_{E'}(x') <x'|u_E(x)|x> \\ &= \int dx'\, dx\, u^*_{E'}(x') u_E(x) \delta(x'-x) \\ &= \int dx\, u^*_{E'}(x) u_E(x) \\ &= \delta(E'-E)\, . \end{aligned}$$

In dieser *Energie-Darstellung*, auch *Heisenberg-Darstellung* genannt, ist der Hamilton-Operator nach Konstruktion diagonal:

$$<E'|\mathbf{H}|E> = \ E<E'|E> = \ E\delta(E'-E) \ .$$

Die Matrixelemente des Ortsoperators in der Energiedarstellung sind durch

$$\begin{aligned} < E'|\mathbf{Q}|E > &= \int dx \ < E'|\mathbf{Q}|x >< x|E > \\ &= \int dx\, x < E'|x >< x|E > \\ &= \int dx\, u^*_{E'}(x)\, x\, u_E(x) \end{aligned}$$

gegeben, die des Impulsoperators durch

$$\begin{aligned} < E'|\mathbf{P}|E > &= \int dp\, \tilde{u}^*_{E'}(p)\, p\, \tilde{u}_E(p) \\ \tilde{u}_E(p) &= < p|E > \ . \end{aligned}$$

8.2 Die Dichte–Matrix

Statistische Überlagerung von Zuständen

Wir haben bisher nur solche quantenmechanischen Systeme diskutiert, die sich in einem ganz bestimmten Zustand $\psi(\vec{x}, t)$, $u(\vec{x})$ etc. befinden; dieser Zustand kann natürlich als Linearkombination einer beliebigen Basis beschrieben werden. Das System befindet sich jedoch in genau einem Zustand.

In vielen Fällen — z. B. bei atomaren Teilchen in einem Strahl, bzw. bei der Thermodynamik von quantenmechanischen Systemen – weiß man jedoch nicht, in genau welchem Zustand sich ein System befindet, sondern man kann nur gewisse Wahrscheinlichkeiten dafür angeben, das System in einem bestimmten Zustand anzutreffen.

Zustände und Wahrscheinlichkeiten

Es sei

- $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_g)$ ein vollständier Satz von kommutierenden, selbstadjungierten Operatoren,
- $\{|u_j > , \ \ j = (j_1, \ldots, j_g)\}$ die Eigenvektoren hierzu,
- $\mathbf{P}_j$ die Projektionsoperatoren auf die von den u_j aufgespannten, 1–dimensionalen Unterräume und
- w_j, $\sum\limits_j w_j = 1$ die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand u_j zu finden.

Dichte-Operator

Der*Dichte–Operator*

$$\boxed{\rho \ = \ \sum_j w_j \mathbf{P}_j \ = \ \sum_j w_j |u_j >< u_j|}$$

hat u.a. folgende Eigenschaften:

$$\rho^+ \ = \ \rho \ , \qquad \rho\, |u_j > = \ w_j\, |u_j >, \qquad < u_j|\rho|u_k > = \delta_{jk} w_j \ .$$

Die $|u_j>$ sind also Eigenfunktionen von ρ zum Eigenwert w_j. Die Dichte-Matrix ist normiert,

$$\boxed{\sum_j < u_j|\rho|u_j > \equiv \text{ Sp } \rho \ = \ \sum_j w_j \ = \ 1}$$

und aus $w_j^2 \leq w_j$ folgt

$$\text{Sp } (\rho^2) \ = \ \sum_j w_j^2 \ \leq \ 1 \ .$$

Reine und gemichte Zustände

Falls das System sich mit Sicherheit in dem Zustand u_j befindet, d. h. falls $w_j = 1$, $w_k = 0$, $k \neq j$, so ist ρ Projektionsoperator:

$$\rho \ = \ \mathbf{P}_j \ , \qquad \rho^2 \ = \ \rho \ .$$

Umgekehrt folgt aus $\rho^2 = \rho$, Sp $\rho = 1$, daß ρ Projektionsoperator auf einen 1–dimensionalen Unterraum ist. Man sagt dann, das System befinde sich in einem

- *reinen Zustand*, falls $\rho^2 = \rho$ und in einem
- *gemischten Zustand*, falls $\rho^2 \neq \rho$.

Boltzman-Verteilung

Prominentes Beispiel für eine Dichte-Matrix ist der Fall eines quantenmechanischen Systems in einem Wärmebad der Temperatur T. Die einzelnen Zustände sind dann entsprechend ihres Boltzmann-Gewichtes besetzt:

$$\boxed{\rho(\mathbf{H}, T) \ = \ \frac{e^{-\mathbf{H}/kT}}{\text{Sp } (e^{-\mathbf{H}/kT})} \ = \ \sum_j |a_j > \frac{e^{-a_j/kt}}{\text{Sp } (e^{-a_j/kt})} < a_j| \ .}$$

Erwartungswerte

Der Erwartungswert $< \mathbf{A} >_\rho$ eines Operators $\mathbf{A}$ in einem durch die Dichte-Matrix ρ beschriebenen Systems ist

$$< \mathbf{A} >_\rho \ = \ \sum_k a_k w_k \ = \ \sum_k a_k < a_k|\rho|a_k > = \ \sum_k < a_k|\rho \mathbf{A}|a_k > = \ \text{Sp } (\rho \mathbf{A}) \ .$$

Also

$$\boxed{< \mathbf{A} >_\rho = \ \text{Sp } (\rho\, \mathbf{A}) \ = \ \text{Sp } (\mathbf{A}\, \rho) \ .}$$

8.2.1 Beispiel: Spin-1/2-Teilchen

Ein Strahl von Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}\hbar$. Solch ein System besteht in der Regel aus N unabhängig voneinander ("inkohärent") erzeugten Teilchen, von denen für jedes einzelne der Spin wie in Kapitel 7 durch eine 2–komponentige Wellenfunktion $\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_-$ beschrieben wird.

Die allgemeinste hermitesche 2×2–Matrix mit der Spur 1 hat die Form

$$\boxed{\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2}\Big(1 + \vec{P}\cdot\vec{\sigma}\Big)\ , \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix}\ , \\ \vec{P} &= (P_1, P_2, P_3)\ :\quad \textit{Polarisationsvektor}\ , \\ \sigma_j &:\quad \text{Pauli–Matrizen.} \end{aligned}}$$

Reine Zustände
Aus

$$\Big(\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\Big)^2 = ||\vec{P}||^2, \qquad \rho^2 = \frac{1}{4}\Big(1 + ||\vec{P}||^2 + 2\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\Big), \qquad \text{Sp}\ (\rho^2) \le 1, \qquad \text{Sp}\ (\sigma_j) = 0$$

folgt

$$\boxed{\text{Sp}\ \rho^2 = \frac{1}{2}\Big(1 + ||\vec{P}||^2\Big) \le 1, \qquad ||\vec{P}^2|| \le 1\ ,}$$

und somit ist das System in einem *reinen Zustand* falls

$$\boxed{|\vec{P}||^2 = 1, \qquad \rho^2 = \rho\ .}$$

Die Eigenwerte von ρ sind

$$\frac{1}{2}\left(1 \pm \sqrt{||\vec{P}||^2}\right)\ .$$

In einem reinen Zustand $\rho^2 = \rho$ hat die Dichte-Matrix die Eigenwerte $1, 0$.

Allgemeine Quantisierungsachse
Sei nun $\vec{n}$ ein Einheitsvektor, $\vec{n}^2 = 1$. Dann ist

$$\boxed{\mathbf{S}_n = \vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}, \qquad \mathbf{S}_n^2 = \frac{1}{4}\hbar^2}$$

die Komponente von $\vec{\mathbf{S}}$ in Richtung von $\vec{n}$. $\mathbf{S}_n$ hat die Eigenwerte $\pm\frac{1}{2}\hbar$, wir können $\vec{c}$ als *Quantisierungsachse* auffassen.

Projektionsoperatoren
Die beiden Operatoren

$$\boxed{\mathbf{P}_+(\vec{n}) = \frac{1}{2}\Big(1 + \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big)\ , \qquad \mathbf{P}_-(\vec{n}) = \frac{1}{2}\Big(1 - \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big)}$$

sind orthogonalae Projektionsoperatoren denn

$$\mathbf{P}_\pm^2(\vec{n}) = \frac{1}{4}\Big(1 \pm \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big)^2 = \frac{1}{4}\Big(1 \pm 2\vec{n}\cdot\vec{\sigma} + 1\Big) = \mathbf{P}_\pm(\vec{n})$$

und

$$\mathbf{P}_+(\vec{n}) \cdot \mathbf{P}_-(\vec{n}) \;=\; \frac{1}{4}\Big(1 + \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big)\Big(1 - \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big) \;=\; \frac{1}{4}\Big(1 - (\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2\Big) \;=\; 0\,.$$

$\mathbf{P}_\pm(\vec{n})$ projizieren auf die Eigenzustände $\chi_+(\vec{n})$ und $\chi_-(\vec{n})$ von $\mathbf{S}_n = \vec{n}\cdot\mathbf{S}$:

$$\mathbf{S}_n \mathbf{P}_\pm(\vec{n})\chi \;=\; \frac{\hbar}{4}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big(1 \pm \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\Big)\chi \;=\; \frac{\hbar}{4}\Big(\vec{n}\cdot\vec{\sigma} \pm 1\Big)\chi \;=\; \left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)\mathbf{P}_\pm(\vec{n})\chi\,.$$

Polarisierung

Die Wahrscheinlichkeiten $w_\pm(\vec{n})$ einen Spin im Zustand $\chi_\pm(\vec{n})$ zu finden, lassen sich zu

$$\boxed{\begin{aligned} w_+(\vec{n}) \;&\equiv\; \mathrm{Sp}\;(\mathbf{P}_+(\vec{n})\rho) \;=\; \frac{1}{2}\Big(1 + \vec{n}\cdot\vec{P}\Big)\;, \\ w_-(\vec{n}) \;&\equiv\; \mathrm{Sp}\;(\mathbf{P}_-(\vec{n})\rho) \;=\; \frac{1}{2}\Big(1 - \vec{n}\cdot\vec{P}\Big)\;, \\ <\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}}>_\rho \;&=\; \frac{1}{2}\hbar\,\vec{n}\cdot\vec{P}\,. \end{aligned}}$$

berechnen. $\vec{n}\cdot\vec{P}$ heißt der Polarisationsgrad des Strahles in Richtung $\vec{n}$. Experimentell von Relevanz sind u.a. die folgende Fälle:

- $\vec{P} = 0$: der Strahl ist bezüglich jeder Richtung unpolarisiert.
- $\vec{P} = \vec{n}$: der Strahl befindet sich in einem reinen Zustand und ist vollständig in Richtung $\vec{n}$ polarisiert.
- $\vec{P} = (0, 0, P_3)$: Strahl ist nur in 3–Richtung polarisiert; falls $P_3 = 1$, dann handelt es sich um einen reinen Zustand, alle Spins zeigen nach oben.

Im allgemeinen hängt ρ von den 3 reellen Parametern P_i ab, d.h. man braucht 3 unabhängige Messungen, um ρ zu bestimmen.

8.3 Unschärfe–Relationen

Mittlere Schwankungen

Bei gegebener Dichte-Matrix

$$\rho \;=\; \sum_j w_j |u_j><u_j|$$

sind die mittleren Schwankungen ΔA und ΔB der selbstadjungierten Operatoren $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ via

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta A \;&=\; \sqrt{<(\mathbf{A}-<\mathbf{A}>)^2>} \;=\; \sqrt{<\mathbf{A}^2> - <\mathbf{A}>^2}\;, \\ \Delta B \;&=\; \sqrt{<(\mathbf{B}-<\mathbf{B}>)^2>} \;=\; \sqrt{<\mathbf{B}^2> - <\mathbf{B}>^2}\,. \end{aligned}}$$

definiert. Es sei

$$\rho = \sum_j w_j |u_j >< u_j| \quad .$$

Sowohl $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ und $\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger$ seien Observable, also selbstadjungiert. Dann ist auch

- $\mathbf{AB} + \mathbf{BA}$ selbstadjungiert und $< u_j|\mathbf{AB} + \mathbf{BA}|u_j >$ reel,
- $i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA})$ selbstadjungiert und $< u_j|i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA})|u_j >$ reell.

Unschärferelation für reine Zustände

Aus der Schwarz'schen Ungleichung

$$< \psi_1|\psi_1 >< \psi_2|\psi_2 > \;\geq\; | < \psi_1|\psi_2 > |^2$$

folgt

$$\begin{aligned}
< u_j|\mathbf{A}^2|u_j >< u_j|\mathbf{B}^2|u_j > &= < u_j|\mathbf{A}^+\mathbf{A}|u_j >< u_j|\mathbf{B}^+\mathbf{B}|u_j > \\
&\geq | < u_j|\mathbf{A}^+\mathbf{B}|u_j > |^2 \\
&= \left| \frac{1}{2} < u_j|\mathbf{AB} + \mathbf{BA}|u_j > - \frac{i}{2} < u_j|i(\mathbf{AB} - \mathbf{BA})|u_j > \right|^2 \\
&\geq \left| \frac{1}{2} < u_j|[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|u_j > \right|^2 \quad .
\end{aligned}$$

Ersetzt man $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ durch

$$\mathbf{A} - < \mathbf{A} > \;, \qquad \mathbf{B} - < \mathbf{B} > \;,$$

so erhält man

$$\boxed{< u_j|[\mathbf{A} - < \mathbf{A} >]^2|u_j >< u_j|[\mathbf{B} - < \mathbf{B} >]^2|u_j > \;\geq\; \left| \frac{1}{2} < u_j|[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|u_j > \right|^2}$$

die *Unschärfe-Relation für einen reinen Zustand.*

Gemische Zustände

Wir fassen $u_j^{(A)} = \sqrt{w_j} < u_j|[\mathbf{A} - < \mathbf{A} >]^2|u_j >^{1/2}$ und $u_j^{(B)} = \sqrt{w_j} < u_j|[\mathbf{B} - < \mathbf{B} >]^2|u_j >^{1/2}$ als Komponenten der (unendlich dimensionalen) Vektoren

$$\vec{u}^{(A)} = (u_1^{(A)}, u_2^{(A)}, \ldots), \qquad \vec{u}^{(B)} = (u_1^{(B)}, u_2^{(B)}, \ldots)$$

auf, auf die man ebenfalls die Schwarz'sche Ungleichung

$$||\vec{u}^{(A)}|| \cdot ||\vec{u}^{(A)}|| \;\geq\; |\vec{u}^{(A)} \cdot \vec{u}^{(A)}|^2, \qquad A \leftrightarrow B$$

anwenden kann. Man erhält

$$\begin{aligned}
&\sum_j w_j < u_j|[\mathbf{A} - < \mathbf{A} >]^2 \,|u_j > \;\sum_k w_k < u_k|[\mathbf{B} - < \mathbf{B} >]^2 \,|u_k > \\
\geq &\left| \sum_k w_k \left(< u_k|[\mathbf{A} - < \mathbf{A} >]^2|u_k > < u_k|[\mathbf{B} - < \mathbf{B} >]^2|u_k > \right)^{1/2} \right|^2 \\
\geq &\left| \frac{1}{2} \sum_k w_k < u_k|[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|u_k > \right|^2 \quad ,
\end{aligned}$$

und schließlich mit

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} \mid < [\mathbf{A}, \mathbf{B}] > \mid}$$

die *allgemeine Unschärfe-Relation* für zwei Operatoren im Zustand ρ.

Heisenberg'sche Unschärferelation

Für $\mathbf{A} = \mathbf{P}$ und $\mathbf{B} = \mathbf{Q}$ ist $[\mathbf{P}, \mathbf{Q}] = \hbar/i$, also

$$\boxed{(\Delta P)(\Delta Q) \ \geq \ \frac{1}{2}\hbar \ .}$$

Minimale Unschärfe

Bei der Herleitung der Unschärfe-Relation hatten wir zweimal nach unten abgeschätzt. Für Zustände minimaler Unschärfe müssen beide Abschätzungen zu Gleichheiten werden.
(A) Aus der Schwarz'schen Ungleichung wird eine Gleichung,

$$(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \ = \ |(\psi_1, \psi_2)|^2 \qquad \Leftrightarrow \qquad \psi_2 \ = \ \lambda\psi_1 \ .$$

Angewandt auf

$$\psi_2 \ = \ (\mathbf{A} - < \mathbf{A} >)\tilde{u} \ \equiv \ \Delta\mathbf{A}\tilde{u}, \qquad \psi_1 \ = \ (\mathbf{B} - < \mathbf{B} >)\tilde{u} \ \equiv \ \Delta\mathbf{B}\tilde{u}$$

bedeutet dies

$$(\mathbf{A} - < \mathbf{A} >)\tilde{u} \ = \ \lambda(\mathbf{B} - < \mathbf{B} >)\tilde{u} \ .$$

(B) Ferner ist

$$| < \tilde{u}|\Delta\mathbf{A}^{+}\Delta\mathbf{B}|\tilde{u} > |^2 \ = \ \left| \frac{1}{2} < \tilde{u}|[\Delta\mathbf{A}, \Delta\mathbf{B}]|\tilde{u} > \right|^2$$

$$\Leftrightarrow \qquad < \tilde{u}|\Delta\mathbf{A}\Delta\mathbf{B}|\tilde{u} > = \ - < \tilde{u}|\Delta\mathbf{B}\Delta\mathbf{A}|\tilde{u} >, \qquad \lambda^* = -\lambda \ .$$

Folglich muss λ ist rein imaginär sein, $\lambda = i\gamma$, und damit

$$\boxed{(\mathbf{A} - < \mathbf{A} >)\tilde{u} \ = \ i\gamma(\mathbf{B} - < \mathbf{B} >)\tilde{u} \ , \qquad \gamma \text{ reell.}}$$

Für gegebene $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ist dies eine Bestimmungsgleichung für $\tilde{u}$.

Gauss'sche Wellenpakte

Als Beispiel für Zustände mit minimaler Unschärfe betrachten wir

$$\mathbf{A} \ = \ \mathbf{P} \ = \ \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \ , \qquad \mathbf{B} \ = \ \mathbf{Q} \ = \ x \ , \qquad < \mathbf{P} > = \ p_0 \ , \qquad < \mathbf{Q} > = \ x_0 \ .$$

Die Differentialgleichung

$$\boxed{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - p_0\right) \tilde{u} \ = \ i\gamma(x - x_0)\tilde{u}(x) \ ,}$$

hat die Lösung

$$\boxed{\tilde{u}(x) \ = \ const. \ e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} \ e^{-\frac{\gamma}{2\hbar}(x - x_0)^2} \ ,}$$

d.h. die Gaußschen Wellenpakete haben die Eigenschaft $(\Delta Q)(\Delta P) = \frac{1}{2}\hbar$.