- **Produkte von Operatoren. Kommutator**

Def.: $\left(\hat{A}\hat{B}\right)|\psi\rangle = \hat{A}\left(\hat{B}|\psi\rangle\right)$ (5.10)

Im Allgemeinen sind Operatoren nicht vertauschbar. Die Differenz

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] := \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{5.11}$$

wird Kommutator der Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ genannt.

■ $$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right] \underset{\text{Ortsd.}}{=} x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x = i\hbar\left(-x\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}x\right) = i\hbar\left(-x\frac{\partial}{\partial x}+1+x\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar$$

$\rightarrow$ komplexe Zahl

■ $$\left[\frac{\partial}{\partial x_i},\frac{\partial}{\partial x_j}\right] = \frac{\partial^2}{\partial x_i\,\partial x_j}-\frac{\partial^2}{\partial x_j\,\partial x_i} = 0 \quad \text{(stetige WF)}$$

■ $$\left[x_i,\frac{\partial}{\partial x_j}\right] \underset{\text{Ortsd.}}{=} x_i\frac{\partial}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}x_i = x_i\frac{\partial}{\partial x_j}-\delta_{ij}-x_i\frac{\partial}{\partial x_j} = -\,\delta_{ij} \text{ also } \underline{\left[\hat{x}_i,\hat{p}_j\right] = i\hbar\,\delta_{ij}} \quad (5.12)$$

Bem.: Vergleiche mit fundamentalen Poisson-Klammern.

■ Komponenten des Bahndrehimpulses

Drehimpuls $\underline{L} = \underline{r}\times\underline{p} \xrightarrow[\text{prinzip}]{\text{Korrespondenz−}} \hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}}\times\hat{\underline{p}} \underset{\text{darst.}}{\overset{\text{Orts−}}{=}} \frac{\hbar}{i}\,\underline{r}\times\underline{\nabla}$

Für den Kommutator der Operatoren der Komponenten des Drehimpulses erhalten wir

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = \left[y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z\right] = \left[y\hat{p}_z, z\hat{p}_x\right] - \underbrace{\left[y\hat{p}_z, x\hat{p}_z\right]}_{\text{Null}} - \underbrace{\left[z\hat{p}_y, z\hat{p}_x\right]}_{\text{Null}} + \left[z\hat{p}_y, x\hat{p}_z\right] =$$

$$= y\hat{p}_x\underbrace{\left[\hat{p}_z, z\right]}_{-i\hbar} + x\hat{p}_y\underbrace{\left[z,\hat{p}_z\right]}_{i\hbar} = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z$$

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, \hat{L}_k \tag{5.13}$$

- Für den Hamilton-Operator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r})$ eines qmT bei Bewegung in $U(\underline{r})$ ist

$$\left[\hat{H}, \hat{x}_i\right] = -i\frac{\hbar}{m}\hat{p}_i \quad \text{und} \quad \left[\hat{H}, \hat{p}_i\right] = \left[U(\underline{r}), -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right] = -i\hbar\frac{\partial U}{\partial x_i} \tag{5.14}$$

- Matrixelemente von $\hat{A}\,\hat{B}$

$$\left(\hat{A}\,\hat{B}\right)_{nn'} = \langle n|\hat{A}\,\hat{B}|n'\rangle = \langle n|\hat{A}\;\hat{1}\;\hat{B}|n'\rangle = \sum_k \langle n|\hat{A}\,|k\rangle\langle k|\,\hat{B}|n'\rangle = \sum_k A_{nk}\, B_{kn'} \tag{5.15}$$

$\rightarrow$ Matrizenmultiplikation

- Beachte die Relationen

(i) $\left[\hat{A}\,\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$

(ii) $e^{\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \;...$ $\rightarrow$ **Baker-Hausdorff-Identität**

wobei der Ausdruck $e^{\hat{A}}$ durch die Potenzreihe $e^{\hat{A}} := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{A}^n$ definiert ist .

Satz: Zwei lineare Operatoren haben genau dann einen gemeinsamen VONS von EF, wenn sie kommutieren.

Beweis:

(→) Angenommen, $\hat{A}$ und $\hat{B}$ haben einen gemeinsamen VONS von EF $\{|\psi_n\rangle\}$, d.h. $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ und $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$. Dann gilt für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \underset{\text{Vollst.}}{=} \hat{A}\hat{B}\sum_n c_n|\psi_n\rangle = \hat{A}\sum_n c_n \hat{B}|\psi_n\rangle = \hat{A}\sum_n c_n b_n|\psi_n\rangle = \sum_n c_n b_n \hat{A}|\psi_n\rangle = \sum_n c_n b_n a_n|\psi_n\rangle$$

bzw.

$$\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \ldots = \sum_n c_n a_n b_n|\psi_n\rangle .$$

Also ist $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle - \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = 0$, für beliebige $|\psi\rangle$, denn die EW sind als i.a. komplexe Zahlen beliebig vertauschbar.

(←) Sei $[\hat{A},\hat{B}] = 0$. Dann ist mit $|\psi_n\rangle$ auch $\hat{B}|\psi_n\rangle$ Lösung des EWP $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$, also EF von $\hat{A}$, denn

$$\hat{A}\left(\hat{B}|\psi_n\rangle\right) = \hat{B}\hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{B}a_n|\psi_n\rangle = a_n\left(\hat{B}|\psi_n\rangle\right) .$$

Angenommen, der **EW a_n** ist **nicht entartet**. Dann entspricht ihm (bis auf Multiplikation mit einer (Normierungs)Konstanten) genau eine EF $|\psi_n\rangle$, es muss also $\hat{B}|\psi_n\rangle = \text{const}|\psi_n\rangle =: b_n|\psi_n\rangle$.

Das bedeutet, $|\psi_n\rangle$ ist auch EF von $\hat{B}$ (zum EW b_n).

Im Fall **a_n entartet** wird der Beweis etwas aufwendiger, da dann $\hat{B}|\psi_n\rangle \neq \text{const}|\psi_n\rangle$ möglich ist:

Angenommen, der EW a_n ist k-fach entartet und $\{|\psi_n^{(1)}\rangle,...,|\psi_n^{(k)}\rangle\}$ eine Basis im Eigenraum von $\hat{A}$ zu diesem a_n. Wie oben gezeigt, sind alle $\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle$ $i = 1,...,k$ auch EF zu $\hat{A}$, d.h. nach den $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$ entwickelbar $\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle = \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(i)}\rangle$ (*).

Wir behaupten, es gibt EF von $\hat{B}$, die passende Linearkombinationen der $|\psi_n^{(i)}\rangle$ und damit auch EF von $\hat{A}$ sind: Wir suchen also $|\phi\rangle$ derart, dass gilt

$$\hat{B}|\phi\rangle = b|\phi\rangle \quad \text{und} \quad |\phi\rangle = \sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \quad .$$

Wir haben

$$\hat{B}|\phi\rangle = \hat{B}\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle = b\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}|\phi\rangle = \hat{B}\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle = \sum_i^k c_i\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle \overset{(*)}{=} \sum_i^k c_i \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle$$

also

$$\sum_i^k c_i \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle = b\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \quad \text{und schließlich} \quad \sum_j^k \left(\sum_i^k c_i\, c_{ij} - b\, c_i\, \delta_{ij}\right)|\psi_n^{(i)}\rangle = 0 \quad .$$

Das führt auf das EWP $\underline{\sum_i^k (c_{ij} - b\,\delta_{ij})\,c_i \;= 0}$ für die Matrix c_{ij} :

$$\begin{pmatrix} c_{11}-b & c_{12} & \dots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22}-b & \dots & c_{2k} \\ \therefore & \therefore & \therefore & \therefore \\ c_{k1} & c_{k2} & \dots & c_{kk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \therefore \\ c_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \therefore \\ 0 \end{pmatrix}$$

Es hat k Lösungen; diese sind reell, wenn $\hat{B}$ ein hermitescher Operator ist (s.u). Beachte, dass allen $|\phi^{(i)}\rangle = \sum_j^k c_j^{(i)}|\psi_n^{(j)}\rangle$ derselbe EW a_n bzgl. $\hat{A}$, aber i.a. unterschiedliche EW $b^{(i)}$ bzgl. $\hat{B}$ entsprechen.

- **Adjungierte und selbstadjungierte Operatoren.**

Im Zusammenhang mit Operatoren im Skalarprodukt $\left\langle \phi \middle| \hat{Q}\psi \right\rangle = \int d^f x\, \phi^*(\underline{x})\, \hat{Q}\psi(\underline{x})$ definieren wir den adjungierten Operator $\hat{Q}^+$.

Def.: $\hat{Q}^+$ ist der zu $\hat{Q}$ adjungierte Operator, wenn für beliebige Kets $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ gilt

$$\left\langle \hat{Q}^+\phi \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \phi \middle| \hat{Q}\psi \right\rangle \;,\quad |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{5.16}$$

Def.: $\hat{Q}$ heißt selbstadjungiert oder hermitesch , wenn $\hat{Q}^+ = \hat{Q}$. (5.17)

Eigenschaften:

(i) $(\hat{Q}^+)^+ = \hat{Q}$, $(\lambda \hat{Q})^+ = \lambda^* \hat{Q}$ $(\lambda \in C)$

(ii) Mit $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ist auch $\alpha \hat{A} + \beta \hat{B}$, $\alpha, \beta \in C$ ein selbstadjungierter Operator.

(iii) $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

denn $\left\langle \phi \middle| (\hat{A}\hat{B})^+ \psi \right\rangle = \left\langle (\hat{A}\hat{B})\phi \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \hat{A}(\hat{B}\phi) \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \hat{B}\phi \middle| \hat{A}^+ \psi \right\rangle = \left\langle \phi \middle| \hat{B}^+\hat{A}^+ \psi \right\rangle$.

Also ist das Produkt zweier vertauschbarer hermitescher Operatoren hermitesch

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} .$$

Da jeder Operator mit sich selbst kommutiert, ist der Operator $f(\hat{A})$ hermitesch, wenn $\hat{A}$ hermitesch ist und die Funktion f als Potenzreihe (Taylor-Reihe) darstellbar ist.

(iv) $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^+ = \left[\hat{B}^+, \hat{A}^+\right]$

denn $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^+ = (\hat{A}, \hat{B})^+ - (\hat{B}, \hat{A})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ - \hat{A}^+\hat{B}^+ = \left[\hat{B}^+, \hat{A}^+\right]$.

Folglich ist der Kommutator aus zwei <u>hermiteschen</u> Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ antihermitesch

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]^{+}=\left[\hat{B}^{+},\hat{A}^{+}\right]=\left[\hat{B},\hat{A}\right]=-\left[\hat{A},\hat{B}\right] \ .$$

Dagegen ist der Operator $i\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ hermitesch, wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ hermitesch sind.

■ Beweisen Sie, dass $\hat{\underline{p}}=-i\hbar\underline{\nabla}$ und $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2+U(\underline{r})$ hermitesche Operatoren sind.

Z.B. $\int\limits_{-\infty}^{\infty} d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\psi(\underline{r})\right)^{*}\phi(\underline{r}) \underset{\uparrow}{=} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d^3r\ \psi^{*}(\underline{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\,\phi(\underline{r})\right)$, ↑ zweimal partiell integrieren

unter der Voraussetzung, dass $\psi(\underline{r})$ und $\phi(\underline{r})$ im Unendlichen verschwinden.

• Eigenwerte und Eigenfunktionen hermitescher Operatoren

$\left|\psi_n\right\rangle$ ist Eigenfunktion (→ Eigenvektor, Eigenzustand) des Operators $\hat{Q}$ zum Eigenwert q_n wenn gilt

$$\hat{Q}\left|\psi_n\right\rangle = q_n\left|\psi_n\right\rangle \quad \rightarrow \text{ Eigenwertgleichung.} \tag{5.18}$$

Satz: EW hermitescher Operatoren sind reell.

<u>Beweis:</u>

$$\left\langle\psi_n\middle|\hat{Q}\psi_n\right\rangle = \left\langle\psi_n\middle|q_n\,\psi_n\right\rangle = q_n\left\langle\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle$$

$$\left\langle\psi_n\middle|\hat{Q}\psi_n\right\rangle = \left\langle\hat{Q}^{+}\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle = \left\langle\hat{Q}\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle = \left\langle q_n\,\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle = q_n^{*}\left\langle\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle$$

−) −−

$$0=(q_n-q_n^{*})\left\langle\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle$$

Da $\left\langle\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle \neq 0$ folgt $q_n = q_n^{*}$ (für diskretes und kontinuierliches Spektrum).

Satz: EF hermitescher Operatoren zu unterschiedlichen EW sind orthogonal.

Beweis: Seien die EW q_n und q_m des $\hat{Q}^+ = \hat{Q}$ entsprechend $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$ und $\hat{Q}|\psi_m\rangle = q_m|\psi_m\rangle$ nicht entartet. Wir haben

$$q_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{Q}\psi_n\rangle \underset{\hat{Q}^+=\hat{Q}}{=} \langle\hat{Q}\psi_m|\psi_n\rangle = q_m^* \langle\psi_m|\psi_n\rangle \underset{q_m=q_m^*}{=} q_m \langle\psi_m|\psi_n\rangle .$$

Daraus folgt $0 = (q_n - q_m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle$ bzw. $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$ für $q_n \neq q_m$.

Auch wenn mehrere EF zu einem EW gehören, also im Fall der Entartung, können die EF eines hermiteschen Operators immer so gewählt werden, dass die Orthogonalitätsrelationen erfüllt sind ($\rightarrow$ Hilbert-Schmidt-Verfahren, vgl. S. 4).

5.5 Fünf Postulate

1. Postulat: Zustand eines quantenmechanischen Systems (qmS)

Alle physikalischen Eigenschaften eines qmS zur Zeit t sind im Zustandsvektor (ZV) $|\psi(t)\rangle$ codiert. Alle möglichen Zustände bilden einen linearen Raum, den Zustandsraum $\mathcal{H}$.

Beachte:
1. Da $\mathcal{H}$ linear, ergeben Linearkombinationen von ZV neue ZV $\rightarrow$ Superpositionsprinzip.

2. Postulat: Physikalische Größen

Jede Observable[1)] Q wird durch einen im Zustandsraum $\mathcal{H}$ wirkenden linearen hermiteschen Operator beschrieben.

Folge: EF von $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ bilden VONS, also eine Basis in $\mathcal{H}$, und EW von $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ reell.

Fazit: QM beschreibt den Zustand eines Systems durch einen Vektor $|\psi(t)\rangle$, die Observablen, also die beobachtbaren (messbaren) physikalischen Größen (Energie, Ort, Impuls, Drehimpuls, usw.), durch hermitesche Operatoren im $\mathcal{H}$.

- Messung physikalischer Größen

3. Postulat: Messwerte, Zustandsreduktion

Wird eine Observable Q im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, so kann das Messergebnis nur einer der EW des zugeordneten Operators $\hat{Q}$ sein.

Zusatz: Unmittelbar nach der Messung befindet sich das qmS in dem zum EW q_n gehörenden Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ (entsprechend $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$).

Also: Messe Q im Zustand $\overset{\text{I. Postulat}}{\rightarrow}$ $|\psi\rangle$ bedeutet Zuordnung $Q \underset{\text{II. Postulat}}{\rightarrow} \hat{Q}$ und

$$\hat{Q}|\psi_n\rangle = \underset{\text{Messwerte}}{q_n} \overset{\substack{\text{Zustand unmittelbar}\\ \text{nach der Messung}}}{|\psi_n\rangle} .$$

Dass die EW von $\hat{Q}$ die möglichen Messwerte von Q sind ist einer der Gründe, den Observablen hermitesche Operatoren zuzuordnen. Bei diskretem Spektrum von $\hat{Q}$ sind die möglichen Messergebnisse "quantisiert".

Beachte: Messung ändert den Zustand! $|\psi\rangle \underset{\text{mit Ergebnis } q_n}{\overset{\text{Messung von Q}}{\longrightarrow}} |\psi_n\rangle \rightarrow$ Zustandsreduktion

Eine (unmittelbar) anschließende zweite Messung trifft qmS u.U. bereits in einem anderen Zustand an.

• Welcher der möglichen Messwerte q_n wird tatsächlich gemessen? Die Antwort auf diese Frage ist abhängig von Systemzustand $|\psi\rangle$ und statistischer Natur.

4. Postulat: Messwahrscheinlichkeiten

Wird die Observable Q eines qmS im (normierten) Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis der (nichtentartete) EW des dazugehörigen (hermiteschen) Operators $\hat{Q}$ ist, gleich

$$\mathrm{Prob}(q = q_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 \quad , \quad \hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle . \tag{5.19}$$

Anders formuliert: Der Zustand $|\psi\rangle$, in dem die Observable Q gemessen werden soll (er sei bekannt) ist als Superposition der EF $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ darstellbar (da $\hat{Q} = \hat{Q}^+$, bildet $\{|\psi_n\rangle\}$ eine Basis in $\mathcal{H}$)

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle, \; c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle .$$

Die Wahrscheinlichkeit der Messergebnisse ist durch das Betragsquadrat der Entwicklungskoeffizienten gegeben.

Bei entartetem Spektrum gilt

$$\mathrm{Prob}(q = q_n) = \sum_{1=1}^{g_n} |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 . \tag{5.20}$$

Dabei ist g_n der Entartungsgrad des EW q_n und $\{|\psi_n^i\rangle\}$ das System orthonormierter Vektoren, die im Eigenraum $\mathcal{H}_n$ zum EW q_n von $\hat{Q}$ eine Basis bilden.

Beachte: Für die bedingte Wahrscheinlichkeit Prob($q = q_m$| $q = q_n$) gilt

$$\mathrm{Prob}(q = q_m \mid q = q_n) = \left|\langle \psi_n | \psi \rangle\right|^2 = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \tag{5.21}$$

$\rightarrow$ Eine "zeitnahe" erneute Messung von Q ergibt mit Sicherheit wieder q_n. Offensichtlich sichert die Zustandsreduktion die Reproduzierbarkeit der Messung: Für eine Theorie, die Anspruch auf die Beschreibung von Experimenten erhebt, ist die Reproduzierbarkeit einer Messung unverzichtbar.

Fazit:

Sicher ist ($\rightarrow$ 3. Postulat), dass eine Messung von Q im Zustand $|\psi\rangle$ ($\rightarrow$ 1. Postulat) einen Eigenwert q_n aus dem Spektrum des repräsentierenden Operators $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ ($\rightarrow$ 2. Postulat) ergibt. Welcher der Eigenwerte tatsächlich gemessen wird, kann nur mit einer Wahrscheinlichkeit $\left|\langle \psi_n | \psi \rangle\right|^2$ vorhergesagt werden ($\rightarrow$ 4. Postulat).

- **Quantenmechanischer Erwartungswert (qmEWW) einer Observablen Q im Zustand $|\psi\rangle$.**

Wir haben

$$\langle \hat{Q} \rangle = \sum_n q_n \, \mathrm{Prob}(q = q_n) = \tag{5.22}$$

$$= \sum_n q_n \left|\langle \psi_n | \psi \rangle\right|^2 = \sum_n q_n \langle \psi_n | \psi \rangle^* \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n q_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | q_n \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle \underset{EWG}{=}$$

$$= \sum_n \langle \psi | \hat{Q} \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | \hat{Q} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \underbrace{\left(\sum_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \right)}_{\hat{1}} | \psi \rangle = \underline{\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \langle \hat{Q} \rangle_{|\psi\rangle}} \, .$$

Dieser (darstellungsunabhängige) Ausdruck für den qmEWW verallgemeinert die uns aus der Schrödinger´schen Wellenmechanik bekannte Relation

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int d^3r \; \psi^*(\underline{r}) \; \hat{Q} \; \psi(\underline{r})$$

- **Projektionsoperator und Messung**

Die Wahrscheinlichkeit, mit der q_n gemessen wird, ist

$$\mathrm{Prob}(q = q_n) = \left|\left\langle \psi_n | \psi \right\rangle\right|^2 = \left\langle \psi | \psi_n \right\rangle \left\langle \psi_n | \psi \right\rangle = \left\langle \psi \right| \hat{P}_{|\psi_n\rangle} \left| \psi \right\rangle ,$$

also gleich dem qmEWW des Projektors $\hat{P}_{|n\rangle} \equiv \hat{P}_{|\psi_n\rangle} = \left|\psi_n\right\rangle\left\langle\psi_n\right|$. Da mit Sicherheit einer der EW von $\hat{Q}$ gemessen wird, muss gelten

$$1 = \sum_n \mathrm{Prob}(q = q_n) = \sum_n \left\langle \psi | \psi_n \right\rangle \left\langle \psi_n | \psi \right\rangle = \left\langle \psi | \psi \right\rangle = 1 . \quad \text{(vgl. 4. Postulat)}$$

Das ist die darstellungsunabhängige Formulierung der Normierungsbedingung, die wir in der Schrödingerschen Wellenmechanik in der Form

$$\int d^3r \; \psi^*(\underline{r})\, \psi(\underline{r}) = 1$$

bereits kennen gelernt haben ($\rightarrow$ statistische Interpretation der Wellenfunktion).

Außerdem lässt sich der qmEWW in der Form

$$\left\langle \hat{Q} \right\rangle = \sum_n q_n \left|\left\langle \psi_n | \psi \right\rangle\right|^2 = \sum_n q_n \left|\left\langle \psi_n | \psi \right\rangle\right|^2 = \sum_n q_n \left\langle \psi_n | \psi \right\rangle \left\langle \psi | \psi_n \right\rangle = \sum_n \left\langle \psi_n \right| \underset{*********}{\left.\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|} \left. \hat{Q}\, \psi_n \right\rangle$$

also

$$\left\langle \hat{Q} \right\rangle = \sum_n \left\langle \psi_n \right| \hat{P}_{|\psi\rangle} \cdot \hat{Q} \left| \psi_n \right\rangle = \mathrm{Sp}\left(\hat{P}_{|\psi\rangle} \cdot \hat{Q}\right)$$

darstellen.

5. Postulat: Zeitliche Entwicklung des Zustandes

Die zeitliche Entwicklung des ZV $|\psi\rangle$ wird durch

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad \rightarrow \textbf{ Schrödinger-Gleichung} \qquad (5.23)$$

mit dem (hermiteschen) **Hamilton-Operator** des qmS beschrieben.

Bem.: Gemeint ist die zeitliche Entwicklung des Zustand zwischen zwei Messungen; ansonsten Zustandsreduktion.