5. **Abstrakte Formulierung der Quantenmechanik** im Hilbert-Raum H

Motivation/offene Frage: Verbirgt sich hinter den in Kapitel 4 behandelten äquivalenten Beschreibungen des Zustandes eines quantenmechanischen Teilchens mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsamplituden $\psi(\underline{r},t)$ bzw. $\phi(\underline{p},t)$ eine tiefere mathematische Struktur?

Existieren weitere "Darstellungen der Quantenmechanik"?

Antwort am Ende dieser Woche: Der Zustand des quantenmechanischen Systems wird als Vektor im Hilbert-Raum H postuliert/beschrieben.

Dieser ist ein ∞ dimensionaler linearer Vektorraum mit speziellem Skalarprodukt.

5.1 Linearer Vektorraum F

Folgende Axiome definieren den linearen Vektorraum (vgl. Vorlesung lineare Algebra):

• Abgeschlossenheit

Für zwei Vektoren $\underline{x}$, $\underline{y}$ sind Addition und Multiplikation mit reellen Zahlen α und β definiert:

Sind $\underline{x}, \underline{y} \in \mathsf{F}$, so ist auch $\underline{z} = \alpha\ \underline{x} + \beta\ \underline{y} \in \mathsf{F}$. **(5.1)**

• Skalarprodukt

Vorschrift, die zwei Vektoren eine reelle Zahl zuordnet. Notation: $\underline{x} \cdot \underline{y}$ **(5.2)**

Eigenschaften: $\underline{x} \cdot \underline{y} = \underline{y} \cdot \underline{x}$, $\underline{x} \cdot \underline{x} \geq 0$, $\underline{z} \cdot (\alpha\underline{x} + \beta\underline{y}) = \alpha\,\underline{z} \cdot \underline{x} + \beta\,\underline{z} \cdot \underline{y}$, α, β - reell. **(5.3)**

Der reelle Skalar $(\underline{x} \cdot \underline{x})^{1/2}$ wird Betrag oder Norm des Vektors $\underline{x}$ genannt.

Zwei Vektoren $\underline{x}$ und $\underline{y}$ heißen orthogonal, wenn $\underline{x} \cdot \underline{y} = 0$ für $\underline{x} \neq 0$, $\underline{y} \neq 0$. **(5.4)**

• Basis und Vollständigkeit

Es existieren Sätze von Vektoren $\{\underline{e}_i\}$, die orthonormiert sind, d.h. $\underline{e}_i \cdot \underline{e}_k = \delta_{ik}$, i = 1, …, n.

Diese bilden eine sogenannte Basis in F.

Vollständigkeit bedeutet: Jeder Vektor $\underline{x} \in \mathsf{F}$ ist als Linearkombination der Basisvektoren darstellbar

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{n} c_i \, \underline{e}_i \quad , \quad c_i = \underline{x} \cdot \underline{e}_i \, . \qquad \textbf{(5.5)}$$

Die Entwicklungskoeffizienten c_i sind die Skalarprodukte der Vektoren $\underline{x}$ und $\underline{e}_i$.
Der Spaltenvektor aus den Entwicklungskoeffizienten

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \therefore \\ c_n \end{pmatrix}$$ heißt Darstellung des Vektors $\underline{x} \in \mathsf{F}$ zur Basis $\{\underline{e}_i\}$. **(5.6)**

Wichtig: In Abhängigkeit von der Wahl der Basis sind offensichtlich unterschiedliche, äquivalente Darstellungen des Vektors $\underline{x} \in \mathsf{F}$ möglich.

Die Axiome des linearen Vektorraums werden z.B. erfüllt von:

■ Vektoren im dreidimensionalen Euklidischen Raum ($n = 3$) (vgl. MMP)

(5.1) $\rightarrow$ Vektoraddition (Kräfteparallelogramm) und Multiplikation eines Vektors mit einer reellen Zahl sind erklärt.

(5.2) $\rightarrow$ Das Skalarprodukt (Länge eines Pfeils multipliziert mit der Länge der Projektion des anderen Pfeils) erfüllt die Eigenschaften (5.3).

(5.4) $\rightarrow$ Eine vollständig orthonormierte Basis bilden z.B. die kartesischen Einheitsvektoren $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3\}$. Die Darstellung des Vektors $\underline{r}$ zu dieser Basis lautet

$$\underline{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = (x_1, x_2, x_3)^T = \sum_{i=1}^{3} x_i \, \underline{e}_i \ \text{ mit } \ x_i = \underline{r} \cdot \underline{e}_i \, .$$

■ Die in [0, L] stetigen reellen Funktionen $f(x)$ einer Variablen x mit $f(0) = F(L) = 0$.

(5.1) $\rightarrow$ Mit $f(x)$ und $g(x)$ g(x) ist auch $h(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$ stetig und reell in [0, L] mit $h(0) = h(L) = 0$.

(5.2) $\rightarrow$ Ein entsprechend der Vorschrift $\int_0^L dx \, f(x) g(x) \underset{\text{Notation}}{=:} (f, g)$ definiertes Skalarprodukt erfüllt alle unter (5.3) geforderten Eigenschaften.

Mögliche Basis<u>funktionen</u> sind z.B. die periodischen Funktionen

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \quad \text{da} \quad (\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm} \ .$$

Im Fall periodischer Funktionen $f(x) = f(x+L)$ folgt die Vollständigkeit, d.h., die Entwickelbarkeit einer beliebigen $f(x)$ nach $\psi_n(x)$ gemäß

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\stackrel{\downarrow}{\infty}} c_n \, \psi_n(x) \ \text{ mit } \ c_n = (\psi_n, f) = \int_0^L dx\, f(x) \psi_n(x) \,,$$

aus der Theorie der Fourier-Reihen.

(5.5) $\rightarrow$ Wie im ersten Beispiel

$$\underline{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = (x_1, x_2, x_3)^T = \sum_{i=1}^{3} x_i \, \underline{e}_i \ \text{ mit } \ x_i = \underline{r} \cdot \underline{e}_i \,,$$

ist im zweiten Beispiel

$$f(x) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \therefore \\ c_n \\ \therefore \end{pmatrix} = \left(c_1, c_2, \ldots, c_n, \ldots\right)^T \ \text{ mit } \ c_n = (\psi_n, f)$$

<u>eine</u> von <u>vielen</u> möglichen unterschiedlichen Darstellungen ein und desselben "Vektors f(x)", nämlich die zur gewählten Basis $\{\psi_n(x)\}$. Im zweiten Beispiel werden Funktionen als Vektoren in einem ∞ - dimensionalen linearen Vektorraum aufgefasst.

Im zweiten Beispiel bilden die orthonormierten Wellenfunktionen für die eindimensionale Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens rechteckigen unendlich tiefen Potenzialtopf die Basis $\{\psi_n(x)\}$ des Vektorraums F. Das bringt uns auf den Gedanken, alle Wellenfunktionen könnten als Elemente eines linearen Vektorraumes / Funktionenraumes mit geeignet definiertem Skalarprodukt aufgefasst werden.

Frage: Wie gehen wir damit um, dass die Wellenfunktionen im Allgemeinen komplexwertig sind?

5.2 Hilbert-Raum H . Dirac-Notation

Wir führen folgende modifizierte Definition des Skalarprodukts aus zwei komplexwertigen Funktionen $\phi(\underline{x})$ und $\psi(\underline{x})$ mehrerer unabhängiger Variabler $\underline{x}$ ein:

$$\int d^f x\ \phi^*(\underline{x})\psi(\underline{x}) \overset{\substack{\text{Notation}\\ \downarrow}}{=:} (\phi,\psi) \quad , \quad \underline{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_f) \tag{5.2'}$$

Eigenschaften (vgl. (5.3):

(i) $(\phi,\psi) = (\phi,\psi)^*$, also: Reihenfolge in (ϕ,ψ) beachten! **(5.3')**

$$\text{denn } (\phi,\psi) = \int d^f x\ \phi^*(\underline{x})\psi(\underline{x}) = \left(\int d^f x\ \phi(\underline{x})\psi^*(\underline{x})\right)^* = \left(\int d^f x\ \psi^*(\underline{x})\ \phi(\underline{x})\right)^* = (\psi,\phi)^* .$$

(ii) $(\psi,\psi) \geq 0$, nach Normierung $(\psi,\psi) = 1$.

(iii) $(\phi, \alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha(\phi,\psi_1) + \beta(\phi,\psi_2)$ $\rightarrow$ linear bzgl. des hinteren Faktors

$(\alpha\phi_1 + \beta\phi_2, \psi) = \alpha^*(\phi_1,\psi) + \beta^*(\phi_2,\psi)$ $\rightarrow$ antilinear bzgl. des vorderen Faktors

wobei nun α, β komplex.

Basis: Es existiert mindestens ein vollständig orthonormiertes System von Basisfunktionen $\{u_n(\underline{x})\}$ (VONS), so dass

$$(u_n, u_m) = \delta_{nm} \text{ und } \psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(\underline{x}) \text{ mit } a_n = (u_n,\psi) \text{ für beliebige } \psi \in \mathsf{H}. \tag{5.5'}$$

Mit $\phi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n u_n(\underline{x})$ folgt

$$\underline{(\psi,\phi)} = \int d^f x \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* u_n^*(\underline{x}) \sum_{m=1}^{\infty} b_m u_m(\underline{x}) = \sum_{n,m=1}^{\infty} a_n^* b_m \underbrace{\int d^f x\ u_n^*(\underline{x}) u_m(\underline{x})}_{\delta_{nm} \leftrightarrow \text{VONS}} = \underline{\sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n} \tag{5.7}$$

Der unendlich dimensionale lineare Vektorraum mit dem Skalarprodukt (5.2') heißt **Hilbert-Raum H**.

- **Dirac-Notation**

Zur Vereinfachung der Schreibweise führte Dirac folgende kompakte Notation ein:

$|\psi\rangle \rightarrow$ bezeichne den Zustandsvektor / die Wellenfunktion im H <u>unabhängig</u> von der Darstellung in einer bestimmten Basis.

Eine Darstellung von $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ zu einer speziell gewählten Basis $\{u_n(\underline{x})\}$

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \therefore \end{pmatrix} =: \underline{\underline{a}} \text{ gemäß } \psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, u_n(\underline{x}) \quad \text{und} \quad \phi = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \therefore \end{pmatrix} =: \underline{\underline{b}} \text{ gemäß } \phi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n\, u_n(\underline{x})$$

kann als Spaltenvektor (Matrix) mit abzählbar (oder überabzählbar) unendlich vielen Elementen aufgefasst werden.

Dann ist das Skalarprodukt (5.7) als Produkt von Matrizen erklärt:

$$(\psi, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n = \underline{\underline{a}}^{*T} \cdot \underline{\underline{b}} = \underline{\underline{a}}^{+} \cdot \underline{\underline{b}} \ .$$

Dabei bedeutet $\underline{\underline{a}}^{*T} = \underline{\underline{a}}^{+} = (a_1^*, a_2^*, a_3^*, \ldots)$ die zum Spaltenvektor $\underline{\underline{a}} = (a_1, a_1, a_1)^T$ adjungierte Matrix (Zeile). Definieren wir

$$\text{Def.: } \langle\psi| \equiv |\psi\rangle^{+} \ , \qquad \textbf{(5.8)}$$

können wir das Skalarprodukt in der Form

$$(\psi, \phi) = \underline{\underline{a}}^{+} \cdot \underline{\underline{b}} = \langle\psi|\cdot|\phi\rangle \underset{\text{Dirac}}{=:} \langle\psi, \phi\rangle$$

notieren. Im Sinne von $\underset{\text{bracket}}{\langle\psi, \phi\rangle} = \underset{\text{bra}}{\langle\psi|} \underset{c}{\cdot} \underset{\text{ket}}{|\phi\rangle}$ spricht Dirac von Ket-Vektor kurz Ket $|\ldots\rangle$, und Bra-Vektor, kurz Bra $\langle\ldots|$.

Beachte:

(i) In der Darstellung von $|\psi\rangle$ zur Basis $\{u_n(\underline{x})\}$ ist $\langle\psi| \equiv |\psi\rangle^{+} = \underline{\underline{a}}^{+}$.

(ii) $\langle\psi|^{+} = |\psi\rangle$, denn $\langle\psi|^{+} = (\underline{\underline{a}}^{+})^{+} = \underline{\underline{a}} = |\psi\rangle$ und $\langle\alpha\psi| = \alpha^*\langle\psi|$, α komplexe Zahl.

(iii) $\langle\psi|\psi\rangle$ ist die Norm des Kets $|\psi\rangle$, dagegen ist $|\psi\rangle\langle\psi|$ ein Operator.

Bra-Vektoren sind Elemente des zu H dualen Raums H * der linearen Funktionale. Das Skalarprodukt $\langle\psi,\phi\rangle$ bezeichnet die komplexe Zahl, die das lineare Funktional $\langle\psi|$ dem Ket $|\phi\rangle$ zuordnet.

Die Dirac-Notation

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |n\rangle\,,\;\; a_n = \langle n|\psi\rangle \quad \text{mit dem VONS } \{|n\rangle\}\text{, d.h. } \langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

ist die verkürzte äquivalente Schreibweise zu

$$\psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(\underline{x})\,,\; a_n = (u_n,\psi) = \int d^f x\; u_n^*(\underline{x})\psi(\underline{x}) \;\text{ mit dem VONS } \{u_n(\underline{x})\}\,,\;\; (u_n,u_m) = \delta_{nm}$$

für beliebige $\psi \in \mathsf{H}$.

5.3 Operatoren im Hilbert-Raum.

Ein Operator $\hat{Q}$ ist eine Vorschrift, die jedem Ket $|\psi\rangle \in \mathsf{H}$ einen neuen Ket $|\psi'\rangle \in \mathsf{H}$

$$|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle := |\hat{Q}\psi\rangle \in \mathsf{H} \tag{5.9}$$

zuordnet. Die in der Quantenmechanik betrachteten Operatoren sind linear, deshalb gilt

$$|\psi'\rangle = \hat{Q}\,(\alpha|\phi\rangle + \beta\,|\psi\rangle) := \alpha\hat{Q}|\phi\rangle + \beta\hat{Q}|\psi\rangle\,,\;\; |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathsf{H}\text{ , und } \alpha, \beta \text{ - komplexe Zahlen.} \tag{5.10}$$

<u>Einheits</u>- und <u>Nulloperator</u> sind über $\hat{1}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$ bzw. $\hat{0}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle \in \mathsf{H}$ definiert.

■ Beispiele für Operatoren

$$x_i\,,\; F(\underline{r},t)\,,\; \frac{\partial}{\partial x_i},\; \frac{\partial}{\partial t},\; \underline{\nabla}\,,\; \Delta\,,\; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r},t)\,,\;\; \underline{\hat{p}} = -i\hbar\underline{\nabla}\text{, usw. usf.}$$

- Aus der Vollständigkeitsrelation in Dirac-Notation folgt mit $a_n = \langle n | \psi \rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \, |\psi\rangle$$

für <u>alle</u> $|\psi\rangle \in$ H. <u>Also</u> ist $|n\rangle\langle n|$ ein Operator mit

$$\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \quad \rightarrow \text{"nahrhafte 1"} \quad . \qquad \textbf{(5.11)}$$

- $\langle \hat{Q}\psi |$ ist der zum Ket $|\hat{Q}\psi\rangle$ gehörende Bra. Deshalb gilt

$\langle \hat{Q}\psi | = |\hat{Q}\psi\rangle^{+} = \left(\hat{Q}\,|\,\psi\rangle\right)^{+} = \langle\,\psi\,|\,\hat{Q}^{+}$.

<u>Merke</u>: Will man den Operator $\hat{Q}$ aus dem Bra $\langle \hat{Q}\psi |$ herausziehen, muss man ihn durch $\hat{Q}^{+}$ ersetzen und rechts vom Bra anfügen.

- Dagegen ist der der Ausdruck $\hat{Q}\,\langle\psi|$ nicht definiert, denn der Bra $\langle\psi| \notin$ **H** .

- **Matrizendarstellung von Operatoren** (vgl. Vorlesung lineare Algebra)

Das Skalarprodukt $\langle\phi|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{Q}\psi\rangle = \langle\phi|\hat{Q}|\psi\rangle$ ist i.a. eine komplexe Zahl. Bei Verwendung von Elementen eines VONS $\{|n\rangle\}$ in Bra und Ket werden die komplexen Zahlen

$\langle n|\hat{Q}|n'\rangle$ $\rightarrow$ Matrixelemente des Operators $\hat{Q}$ zur Basis $\{|n\rangle\}$ **(5.12)**

Matrixelemente des Operators $\hat{Q}$ zur Basis $\{|n\rangle\}$ genannt. Wir erhalten die Darstellung des Operators $\hat{Q}$ zur Basis $\{|n\rangle\}$ in Form der quadratische Matrix mit abzählbar (diskrete Basis) oder überabzählbar (kontinuierliche Basis) unendlich vielen Zeilen und Spalten

$$\hat{Q} \leftrightarrow \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1j} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} . \qquad \textbf{(5.12')}$$

Das kennen wir aus der linearen Algebra: Ein linearer Operator mit diskretem Spektrum (endlich oder abzählbar unendlich viele Eigenwerte) kann als Matrix auf einem (endlich bzw. unendlich dimensionalen) Vektorraum dargestellt werden.

Beispiele

- Matrix-Darstellung von $|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle$:

$$\langle n|\psi'\rangle = \langle n|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle n|\hat{Q}\big|\,\hat{1}\,\big|\psi\rangle = \langle n|\hat{Q}\left(\sum_{n'=1}^{\infty}|n'\rangle\langle n'|\right)|\psi\rangle = \sum_{n'=1}^{\infty}\langle n|\hat{Q}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle.$$

Unter Verwendung der Entwicklungskoeffizienten $b_n = \langle n|\psi'\rangle$ und $a_n = \langle n|\psi\rangle$ folgt

$$b_n = \sum_{n'=1}^{\infty}\langle n|\hat{Q}|n'\rangle\, a_{n'} = \sum_{n'=1}^{\infty} Q_{nn'}\, a_{n'} .$$

Also wird aus der darstellungsunabhängigen Beziehung $|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle$ unter Verwendung der Basis $\{|n\rangle\}$ die Matrixdarstellung von $|\psi'\rangle$, $\hat{Q}$ und $|\psi\rangle$ entsprechend

$$\underline{b} = \underline{\underline{Q}}\,\underline{a}\text{, also}\quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1j} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- Eigenwertgleichung für den Operator $\hat{Q}$ in Matrizendarstellung

$$\hat{Q}\,|\psi_n\rangle = q_n\,|\psi_n\rangle \qquad \textbf{(5.13)}$$

mit Eigenfunktion/Eigenvektor $|\psi_n\rangle$ zum Eigenwert q_n von $\hat{Q}$.

Aus $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle = \hat{1}\,\hat{Q}\,\hat{1}\,|\psi_n\rangle = q_n\,\hat{1}\,|\psi_n\rangle$ folgt mit (5.11)

$$\sum_{i,j=1******}^{\infty}|n_i\rangle\langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle\langle n_j|\psi_n\rangle = q_n\sum_{i=1\;******}^{\infty}|n_i\rangle\langle n_i|\psi_n\rangle \text{ bzw. } \sum_{i,j=1******}^{\infty}|n_i\rangle\left[\left(\langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle - q_n\delta_{ij}\right)\langle n_j|\psi_n\rangle\right] = 0\,.$$

Da die $|n_i\rangle$ linear unabhängig sind (VONS) erhalten wir

$$\sum_{j=1}^{\infty}\left(\langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle - q_n\delta_{ij}\right)\langle n_j|\psi_n\rangle = 0 \quad \text{für alle i.} \qquad (*)$$

Als System aus endlich oder abzählbar unendlich vielen homogenen linearen algebraischen Gleichungen zur Bestimmung der $\langle n_j|\psi_n\rangle$ hat (*) nur dann nichttriviale Lösungen, wenn die Determinante

$$\det\left(\langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle - q_n\delta_{ij}\right) = \det\left(Q_{ij} - q_n\delta_{ij}\right) = 0 \qquad (**)$$

verschwindet. Sind die Matrixelemente Q_{ij} bekannt, lassen sich aus der charakteristischen Gleichung die Eigenwerte q_n bestimmen. Dann werden für jedes q_n aus (**) die Entwicklungskoeffizienten $\langle n_j|\psi_n\rangle$ ermittelt. Die zu q_n gehörende Eigenfunktion ist

$$|\psi_n\rangle = \sum_{j=1}^{\infty}\langle n_j|\psi_n\rangle\;|n_j\rangle\;.$$

<u>Bemerkung</u>: Bei kontinuierlichem Spektrum, also kontinuierlicher Basis $\{|n\rangle\}$, wäre anstelle von (*) die Integralgleichung $\int dn'\,\langle n|\hat{Q}|n'\rangle\,\langle n'|\psi_n\rangle = q\,\langle n|\psi_n\rangle$ zu lösen.

<u>Beachte:</u> Angenommen, die Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ des Operators $\hat{Q}$ bilden ein VONS. Wird der lineare Operator $\hat{Q}$ zur Basis $\{|\psi_n\rangle\}$ dargestellt, so ist die darstellende Matrix diagonal und auf der Diagonalen stehen die Eigenwerte von $\hat{Q}$, denn

$$Q_{ij} = \langle\psi_i|\hat{Q}|\psi_j\rangle = \langle\psi_i|\hat{Q}\psi_j\rangle = \langle\psi_i|q_j\,\psi_j\rangle = q_j\langle\psi_i|\psi_j\rangle = q_j\delta_{ij}\,.$$

Die Bestimmung der Eigenwerte ist also äquivalent zur Diagonalisierung der Matrix Q_{ij}.

- **Produkte von Operatoren. Der Kommutator**

Def.: $(\hat{A}\,\hat{B})\,|\psi\rangle = \hat{A}\,(\hat{B}|\psi\rangle)$ **(5.14)**

Im Allgemeinen sind zwei Operatoren nicht vertauschbar. Die Differenz

$[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ Kommutator **(5.15)**

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

Beispiele

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

■ $$\left[x_i,\frac{\partial}{\partial x_j}\right] \underset{\text{Ortsd.}}{=} x_i\frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}x_i = x_i\frac{\partial}{\partial x_j} - \delta_{ij} - x_i\frac{\partial}{\partial x_j} = -\,\delta_{ij} \quad \text{also} \quad \underline{\left[\hat{x}_i,\hat{p}_j\right] = i\hbar\,\delta_{ij}} \qquad \textbf{(5.16)}$$

Bem.: Vergleiche mit den fundamentalen Poisson-Klammern aus der klassischen Mechanik.

■ Komponenten des Bahndrehimpulses $\underline{L} = \underline{r}\times\underline{p}$ ($\rightarrow$ Übung)

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

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

$$\underline{\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k} \qquad \textbf{(5.17)}$$

■ Für den Hamiltonoperator $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{\underline{r}})$ eines quantenmechanischen Teilchens T bei Bewegung in $U(\underline{r})$ finden wir

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

■ Matrixelemente des Operatoprs $\hat{A}\,\hat{B}$

$$\left(\hat{A}\,\hat{B}\right)_{nm} = \langle n|\hat{A}\,\hat{B}|m\rangle = \langle n|\hat{A}\;\hat{1}\;\hat{B}|m\rangle = \sum_k \langle n|\hat{A}\;|k\rangle\langle k|\;\hat{B}|m\rangle = \sum_k A_{nk}\,B_{km}\,,$$

also Matrizenmultiplikation.

■ Beweise 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.

• Abschließend sei an zwei wichtige Sätze aus der linearen Algebra erinnert:

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

Beweis:

(→) Angenommen, $\hat{A}$ und $\hat{B}$ haben einen gemeinsamen Satz von Eignefunktionen $\{|\psi_n\rangle\}$,

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 $|\psi\rangle \in \mathsf{H}$

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

und analog $\hat{B}\,\hat{A}|\psi\rangle = \;...\; = \sum_n c_n\,a_n\,b_n|\psi_n\rangle$. Es folgt

$$\hat{A}\,\hat{B}|\psi\rangle - \hat{B}\,\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n c_n\,(b_n\,a_n - a_n\,b_n)|\psi_n\rangle = 0$$

für beliebige $|\psi\rangle$, da die i.a. komplexe Zahlen a_n, b_n, c_n vertauschbar sind.

(←) Sei $[\hat{A},\hat{B}]=0$. Dann ist

$\hat{A}(\hat{B}|\psi_n\rangle)=\hat{B}\hat{A}|\psi_n\rangle=\hat{B}a_n|\psi_n\rangle=a_n(\hat{B}|\psi_n\rangle)$, $\hat{A}$

d.h. mit $|\psi_n\rangle$ ist auch $\hat{B}|\psi_n\rangle$ eine Eigenfunktion von $\hat{A}$.

Angenommen, der Eigenwert a_n ist **nicht** entartet. Dann entspricht ihm (bis auf Multiplikation mit einer (Normierungs-)Konstanten) genau eine Eigenfunktion $|\psi_n\rangle$ von $\hat{A}$. Also muss $\hat{B}|\psi_n\rangle=\text{const}|\psi_n\rangle=:b_n|\psi_n\rangle$ gelten. Das bedeutet, $|\psi_n\rangle$ ist auch Eigenfunktion von $\hat{B}$ (zum Eigenwert b_n).

Ist der Eigenwert a_n **entartet**, wird der Beweis aufwendiger, da dann $\hat{B}|\psi_n\rangle\neq\text{const}|\psi_n\rangle$ möglich ist. Angenommen, a_n sei k-fach entartet und $\{|\psi_n^{(1)}\rangle,\dots,|\psi_n^{(k)}\rangle\}$ sei eine Basis im Eigenraum von $\hat{A}$ zu diesem a_n. Wie oben gezeigt, sind alle $\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle$ $i=1,\dots,k$ auch Eigenfunktionen von $\hat{A}$, d.h. nach den $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$ entwickelbar, d.h.

$$\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle=\sum_{j=1}^{k}c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle \quad \textbf{(H)}$$

Daraus folgt

$$\langle\psi_n^{(\ell)}|\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle=\sum_{j=1}^{k}c_{ij}\langle\psi_n^{(\ell)}|\psi_n^{(j)}\rangle=\sum_{j=1}^{k}c_{ij}\,\delta_{\ell j}=c_{i\ell}\,,$$

d.h., die c_{ij} in (H) sind die Matrixelemente von $\hat{B}$ zur Basis $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$.

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

$$\hat{B}|\phi\rangle=b|\phi\rangle \quad \text{und} \quad |\phi\rangle=\sum_{i=1}^{k}c_i|\psi_n^{(i)}\rangle$$

mit unbekannten b und c_i gilt. Dann haben wir einerseits

$$\hat{B}|\phi\rangle=b|\phi\rangle=b\sum_{i=1}^{k}c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \quad \text{und andererseits} \quad \hat{B}|\phi\rangle=\sum_{i=1}^{k}c_i\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle\overset{(H)}{=}\sum_{i=1}^{k}c_i\sum_{j=1}^{k}c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle\text{, also}$$

$$b\sum_{i=1}^{k}c_i|\psi_n^{(i)}\rangle=\sum_{i=1}^{k}c_i\sum_{j=1}^{k}c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle \quad \text{oder} \quad \sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{k}c_i\,c_{ij}-b\,c_i\,\delta_{ij}\right)|\psi_n^{(j)}\rangle=0\ .$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$ führt das auf das Eigenwertproblem

$$\underline{\sum_{i=1}^{k}(c_{ij}-b\,\delta_{ij})c_i = 0} \quad \text{ausgeschrieben} \quad \underline{\begin{pmatrix} c_{11}-b & c_{12} & \dots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22}-b & \dots & c_{2k} \\ \therefore & \therefore & \therefore & \therefore \\ c_{k1} & c_{k2} & \dots & c_{kk}-b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \therefore \\ c_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \therefore \\ 0 \end{pmatrix}} \; .$$

Es besitzt k nichttriviale Eigenwerte $b^{(i)}$ und dazugehörige Eigenvektoren $c_j^{(i)},\ j=1,\dots,k$.

Beachte, dass allen $|\phi^{(i)}\rangle = \sum_{j=1}^{k} c_j^{(i)} |\psi_n^{(j)}\rangle$ zwar derselbe Eigenwert a_n bzgl. $\hat{A}$, aber i.a. unterschiedliche Eigenwerte $b^{(i)}$ bzgl. $\hat{B}$ entsprechen.

- **Adjungierte und selbstadjungierte Operatoren. Hermitesche Konjugation**

Im Zusammenhang mit Operatoren im Skalarprodukt $\langle \phi | \hat{Q}\psi \rangle = \int d^f x\ \phi^*(\underline{x})\ \hat{Q}\psi(\underline{x})$

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

$$\langle \hat{Q}^+\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{Q}\psi \rangle \ , \ \ |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathsf{H} \ . \qquad \textbf{(5.18)}$$

Def.: $\hat{Q}$ heißt selbstadjungiert oder hermitesch , wenn $\hat{Q}^+ = \hat{Q}$. **(5.19)**

<u>Eigenschaften:</u>

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

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

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

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

Also ist das Produkt aus zwei vertauschbaren 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 in eine Potenzreihe (Taylor-Reihe) entwickelbar ist.

<u>Verallgemeinerung</u> (Hermite´sche Konjugation in Dirac-Schreibweise):

(!) Gegeben sei ein Ausdruck aus Konstanten, Kets, Bras und Operatoren.
(?) Gesucht wird der hermitesch konjugierte Ausdruck.
Vorgehensweise: 1) Man nehme folgende Ersetzungen vor
Konstante $\lambda \to \lambda^*$
Ket $|\psi\rangle \to \langle\psi|$
Bra $\langle\psi| \to |\psi\rangle$
Operator $\to$ adjungierter Operator
2) Man kehre nach diesen Ersetzungen die Reihenfolge der Faktoren um; die Anordnung der Konstanten ist dabei beliebig.

Beweis: Matrizenmultiplikation. ■ Beispiele in der Übung

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

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

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

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

■ Beweisen Sie, dass $\underline{\hat{p}} = -i\hbar\underline{\nabla}$ 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.

Bem.: Hermitesche Operatoren werden durch hermitesche Matrizen dargestellt. Deren Diagonalelemente sind reell.

- **Eigenwerte und Eigenfunktionen hermitescher Operatoren**

$|\psi_n\rangle$ ist Eigenfunktion des Operators $\hat{Q}$ zum Eigenwert q_n, wenn $\hat{Q}\,|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$ gilt.

In der linearen Algebra werden die beiden, für uns wichtigen Sätze bewiesen:

Satz: Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.

Beweis: Aus der Eigenwertgleichung $\hat{Q}\,|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$ folgt

$$
\begin{aligned}
&\left\langle \psi_n \middle| \hat{Q}\psi_n \right\rangle = \langle \psi_n | q_n\,\psi_n\rangle = q_n\,\langle \psi_n \,|\, \psi_n\rangle \\
&\left\langle \psi_n \middle| \hat{Q}\psi_n \right\rangle = \left\langle \hat{Q}^+\psi_n \,\middle|\, \psi_n \right\rangle = \left\langle \hat{Q}\psi_n \,\middle|\, \psi_n \right\rangle = \langle q_n\,\psi_n \,|\, \psi_n\rangle = q_n^*\,\langle \psi_n \,|\, \psi_n\rangle \\
-)\ &-------------------------------- \\
&0 = (q_n - q_n^*)\langle \psi_n \,|\, \psi_n\rangle
\end{aligned}
$$

Da $\langle \psi_n \,|\, \psi_n\rangle \neq 0$ folgt $q_n = q_n^*$.

Satz: Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis: Seien die Eigenwerte q_n und q_m des hermite´schen OPerators $\hat{Q}^+ = \hat{Q}$ 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

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

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 im Fall der Entartung, können die Eigenfunktionen eines hermite´schen Operators immer so gewählt werden, dass die Orthogonalitätsrelationen erfüllt sind ($\rightarrow$ Hilbert-Schmidt-Verfahren, s.o.

5.4 Fünf Postulate

1. Postulat: Zustand eines quantenmechanischen Systems

Alle physikalischen Eigenschaften eines quantenmechanischen Systems zur Zeit t sind im Zustandsvektor $\underline{|\psi(t)\rangle}$ codiert. Die möglichen Zustände eines quantenmechanischen Systems bilden den Zustandsraum H (Hilbert-Raum).

2. Postulat: Physikalische Größen. Observable $Q(\underline{r},\underline{p},t)$

Jede Observable Q wird durch einen im Zustandsraum H wirkenden linearen hermiteschen Operator $\hat{Q} = \hat{Q}^{+}$ beschrieben.

Folgen:

(i) Die Eigenfunktionen $\underline{|\psi_n\rangle}$ von $\hat{Q}$ entsprechend $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$ bilden ein VONS (vollständiges System orthonormierter Funktionen), also eine Basis in H.

(ii) Die Eigenwerte $\underline{q_n}$, die quantenmechanischen Erwartungswerte (s.u.) und die Matrixelemente (s.u.) von $\hat{Q}$ sind reell.

(iii) Besitzt $\hat{Q}$ ein diskretes Spektrum, dann ist die Dimension von H abzählbar unendlich, bei kontinuierlichem Spektrum überabzählbar unendlich.

Fazit 1.+2. Postulat: Die Quantenmechanik beschreibt Zustand eines Systems durch einen Vektor, Observablen, also beobachtbare (messbare) physikalische Größen (Energie, Ort, Impuls, Drehimpuls, usw.) durch hermitesche Operatoren im Hilbert-Raum H.

3. Postulat: Messung physikalischer Größen. Messwerte. Zustandsreduktion

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

Unmittelbar nach der Messung im Zustand $|\psi\rangle$ befindet sich das quantenmechanische System in dem zum Eigenwert q_n gehörenden Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ (entsprechend der Eigenwertgleichung $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$).

Beachte: Eine Messung ändert den Zustand! Eine unmittelbar anschließende zweite Messung trifft das quantenmechanische System in der Regel bereits in einem anderen Zustand an:

$$|\psi\rangle \underset{\text{mit Ergebnis}\, q_n}{\overset{\text{Messung von Q}}{\longrightarrow}} |\psi_n\rangle \quad \rightarrow \text{ Zustandsreduktion}$$

Welcher der Eigenwerte aus dem Spektrum von $\hat{Q}$ wird nun aber tatsächlich gemessen? Die Antwort auf diese Frage ist abhängig von Systemzustand $|\psi\rangle$ und statistischer Natur:

4. Postulat: Messwahrscheinlichkeiten

Wird die Observable Q eines quantenmechanischen Systems im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Messergebnis der nichtentartete Eigenwert q_n des zugehörigen Operators $\hat{Q}$ ist, gleich

$$\text{Prob}(q = q_n) = \left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2, \quad \hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle \tag{5.20}$$

Ist der Eigenwert q_n entartet, gehören zu ihm mehrere orthonormierte Eigenfunktionen $|\psi_n^i\rangle$ entsprechend $\hat{Q}|\psi_n^i\rangle = q_n|\psi_n^i\rangle$, $i = 1,\ldots,g_n$. g_n ist der Grad der Entartung des Eigenwerts q_n. In diesem Fall gilt

$$\text{Prob}(q = q_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle\psi_n^i|\psi\rangle\right|^2 . \tag{5.21}$$

$\{|\psi_n^i\rangle\}$ ist das System orthonormierter Funktionen, die im Eigenraum H_n zum Eigenwert q_n von $\hat{Q}$ eine Basis bilden.

Beachte:

1) Der Zustand $|\psi\rangle$ vor der Messung (er sei bekannt), ist als Superposition der Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ darstellbar (da $\hat{Q} = \hat{Q}^+$, bildet $\{|\psi_n\rangle\}$ eine Basis in H):

$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle,\ c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$. Die Messwahrscheinlichkeit für ein bestimmtes q_n, ist also durch das Betragsquadrat der Entwicklungskoeffizienten $c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$ gegeben.

2) Für die bedingte Wahrscheinlichkeit $\mathrm{Prob}(q = q_m \,|\, q = q_n)$ gilt

$$\mathrm{Prob}(q = q_m \,|\, q = q_n) = \left|\langle\psi_m|\psi_n\rangle\right|^2 = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \qquad \textbf{(5.22)}$$

$\rightarrow$ Eine "zeitnahe" erneute Messung von Q (mit derselben Messapparatur) 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 Wahrscheinlichkeit $\left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2$ vorhergesagt werden ($\rightarrow$ 4. Postulat).

5. Postulat: Zeitliche Entwicklung des Zustandes

Die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ folgt der Gleichung

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

mit dem (hermiteschen) **Hamilton-Operator** $\hat{H}$ des quantenmechanischen Systems beschrieben.

Bem.: 1) Gemeint ist die zeitliche Entwicklung des Zustands zwischen zwei Messungen; ansonsten Zustandsreduktion.

2) (5.23) ist die darstellungsunabhängige Schreibweise der Schrödinger-Gleichung im Hilbert-Raum H.