II.2 Postulate der Quantenmechanik (erster Teil)

II.2.1 Zustände und Observablen

Zwei erste Postulate beziehen sich auf die mathematische Darstellung von quantenmechanischen Systemen und den daran messbaren physikalischen Größen.

II.2.1 a Zustände eines quantenmechanischen Systems

Postulat I:

> *Die reinen Zustände eines quantenmechanischen Systems werden durch (normierte) Vektoren eines geeigneten Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ dargestellt. Umgekehrt beschreibt jeder Vektor von $\mathscr{H}$ einen möglichen physikalischen Zustand des Systems.* (II.5)

Die Vektoren des Hilbert-Raums für ein gegebenes System werden *Zustandsvektoren* genannt. Wie später weiter diskutiert wird, stellen zwei solche Vektoren $|\psi\rangle$ und $\alpha|\psi\rangle$, wobei α eine komplexe Zahl ist,[6] den gleichen physikalischen Zustand dar.

In diesem Postulat tritt der Begriff des *reinen Zustands* auf. Dessen genauere Bedeutung wird später präzisiert, nachdem Observablen und Messergebnisse diskutiert worden sind. Es sei vorerst nur gesagt, dass die Spins in einem der Strahlen am Ausgang des Stern–Gerlach-Apparats im Versuch des Abschn. II.1.1 in einem reinen Zustand präpariert sind, während die Spins am Eingang des Apparats, d.h. am Ausgang des Ofens, nicht in einem reinen Zustand sind.

Bemerkung: Ein wichtiges Merkmal in diesem Postulat ist die Linearität des Hilbert-Raums: wenn $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ zwei mögliche Zustände eines physikalischen Systems sind, dann entspricht jede beliebige Linearkombination der beiden Vektoren einem prinzipiell physikalisch realisierbaren Zustand des Systems — auch wenn dies in einem klassischen Rahmen absurd aussieht.

II.2.1 b Messbare Größen eines quantenmechanischen Systems

Postulat II:

> *Jede messbare physikalische Größe eines physikalischen Systems wird in der Quantenmechanik durch einen linearen selbstadjungierten Operator auf dem Hilbert-Raum des Systems dargestellt.*
> *Die möglichen Messwerte der Größe sind die Eigenwerte des assoziierten Operators.* (II.6)

Die messbaren physikalischen Größen werden kürzer *Observablen* des Systems genannt. Die Bezeichnung wird auch im weiteren Sinne für die zugehörigen hermiteschen Operatoren benutzt.

Eine wichtige Schlussfolgerung dieses Postulats ist, dass die möglichen Ergebnisse der Messung einer physikalischen Größe reelle Zahlen sind (vgl. § **??**).

Im Abschn. II.2.3 wird auf die Frage nach der gleichzeitigen Messbarkeit zweier oder mehr Observablen eingegangen.

II.2.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik

Die drei nächsten Postulate befassen sich mit den Resultaten von Messungen. Diese liegen zugrunde der sog. Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik, laut der die Ergebnisse von Messungen einer gegebenen Observablen an einem physikalischen System zufällig sind, wobei die unterliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung vom Zustand des Systems abhängt.

[6] Wegen der Normierung des Zustandsvektors sollte α vom Betrag 1 sein.

II.2.2 a Erwartungswert

Bis auf Sonderfälle, die sich aus den Postulaten der § II.2.2 b–§ II.2.2 c folgern lassen, ist das Ergebnis der Messung einer Observablen an einem einzigen System ist zufällig — dem zweiten Postulat (II.6) nach soll es nur einer der Eigenwerte zum betroffenen Operator sein. Nichtsdestotrotz ist der *Erwartungswert*, d.h. der arithmetische Mittelwert, der möglichen Messwerte eindeutig bestimmt durch den Zustand des Systems vor der Messung.

Postulat III:

> *Der Erwartungswert der Observablen $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$ ist durch $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ gegeben.* (II.7)

Für den Erwartungswert werden die alternativen Notationen

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \equiv \langle\hat{A}\rangle_\psi \equiv \langle\hat{A}\rangle \tag{II.8}$$

benutzt, wobei die letzte — die auch die üblichste ist! — den Nachteil hat, dass der Zustand $|\psi\rangle$ des Systems nicht präzisiert wird.

II.2.2 b Wahrscheinlichkeit eines Ergebnisses

Die zwei nächsten Postulate beziehen sich auf Observablen $\hat{A}$ mit einem diskreten Spektrum von Eigenwerten $\{a_n\}$.(7) Dabei bezeichnet $\{|a_n, r\rangle\}$ einen vollständigen Satz von orthonormierten Eigenzuständen zu $\hat{A}$, wobei der Eigenwert a_n möglicherweise $g(n)$-fach entartet ist.

Postulat IV:

> *Die Wahrscheinlichkeit, in einer Messung der Observablen $\hat{A}$ am Zustand $|\psi\rangle$ eines Systems den Eigenwert a_n zu messen, ist*
>
> $$p_n = \sum_{r=1}^{g(n)} \big|\langle a_n, r|\psi\rangle\big|^2, \tag{II.9a}$$
>
> *wobei $g(n)$ den Entartungsgrad des Eigenwerts a_n bezeichnet.*

Insbesondere ist die Wahrscheinlichkeit, einen nicht-entarteten Eigenwert a_n zu messen, durch

$$p_n = \big|\langle a_n|\psi\rangle\big|^2 \tag{II.9b}$$

gegeben, wobei $|a_n\rangle$ der zugehörige Eigenvektor ist.(8)

Bemerkungen:

∗ In dem Zusammenhang wird das Skalarprodukt $\langle a_n|\psi\rangle$ (oder $\langle a_n, r|\psi\rangle$) aus dem Eigenzustand zur Observablen und dem Zustandsvektor als *Wahrscheinlichkeitsamplitude* bezeichnet.

∗ Die Zerlegung (I.40) des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ auf der Orthonormalbasis $\{|a_n, r\rangle\}$ lautet

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \alpha_{n,r}|a_n, r\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha_{n,r} = \langle a_n, r|\psi\rangle, \tag{II.10}$$

so dass die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle a_n, r|\psi\rangle$ die Komponente von $|\psi\rangle$ entlang $|a_n, r\rangle$ ist. Die Normierung des Zustandsvektors ergibt dann

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \big|\alpha_{n,r}\big|^2 = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \big|\langle a_n, r|\psi\rangle\big|^2, \tag{II.11}$$

(7) Oder allgemeiner, bei Observablen mit einem teilweise diskreten und teilweise kontinuierlichen Spektrum, auf den diskreten Anteil des Spektrums.

(8) ... der eigentlich nur bis auf einen Phasenfaktor $e^{i\delta}$ mit $\delta \in \mathbb{R}$ eindeutig definiert ist.

entsprechend der Aussage, dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten (II.9a), irgendeinen Eigenwert von $\hat{A}$ zu messen, 1 beträgt.

∗ Aus den Wahrscheinlichkeiten (II.9a) für die Einzelergebnisse folgt für den Erwartungswert der Messwerte:

$$\sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} p_n a_n = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \left|\langle a_n, r\,|\psi\rangle\right|^2 a_n = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \langle a_n, r\,|\psi\rangle^* \langle a_n, r\,|\psi\rangle a_n = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \langle \psi\,|a_n, r\rangle \langle a_n, r\,|\psi\rangle a_n.$$

Dabei kann das Produkt aus den komplexen Zahlen $\langle\psi\,|a_n, r\rangle$ und $\langle a_n, r\,|\psi\rangle$ als Matrixelement des (Projektions-)Operator $|a_n, r\rangle\langle a_n, r|$ zwischen dem Bra $\langle\psi|$ und dem Ket $|\psi\rangle$. Unter Nutzung der Linearität wird der Erwartungswert zu

$$\sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} \langle\psi\,|a_n, r\rangle\langle a_n, r\,|\psi\rangle a_n = \langle\psi| \left(\sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} a_n |a_n, r\rangle\langle a_n, r| \right) |\psi\rangle = \langle\psi\,|\hat{A}|\psi\rangle,$$

wobei die Spektralzerlegung (**??**) des Operators $\hat{A}$ anerkannt wurde. Somit findet man das dritte Postulat (II.7) wieder.

Die Verallgemeinerung dieses Postulats auf den Fall einer Observablen mit einem kontinuierlichen Spektrum wird später angegeben.

II.2.2 c Zustand des Systems nach einer Messung

Schließlich beschäftigt sich das nächste Postulat mit dem Effekt eines Messprozesses auf ein quantenmechanisches System.

Postulat V:

Unmittelbar nach einer Messung der Observablen $\hat{A}$ mit Ergebnis a_n befindet sich das System in einem Eigenzustand zu $\hat{A}$ mit Eigenwert a_n. (II.12)

Diese Projektion des Zustandsvektors des Systems auf den Eigenraum zum gefundenen Eigenwert wird *Zustandsreduktion* oder — im Rahmen der Wellenmechanik — *Kollaps der Wellenfunktion* genannt.