Quantenmechanik: Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte

Axiome der Quantenmechanik (reine Zustände):

- Jeder **reiner** Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch eine Wellenfunktion $\psi(x,t)$ beschrieben.
- Jeder **Observablen** $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ entspricht ein selbstadjungierter (hermitescher) Operator $\mathbf{A}$, der diagonalisierbar ist und ausschließlich **reelle Eigenwerte** besitzt.
- Der Mittelwert der Observablen $\boldsymbol{\mathcal{A}}$, die durch den selbstadjungierten Operator $\mathbf{A}$ beschrieben ist, ist im Zustand $\psi(t) \in \mathscr{H}$ durch $\langle \mathbf{A} \rangle_t \in \mathbb{R}$ gegeben.

$$\boxed{\langle \mathbf{A} \rangle_t \; = \; \langle \psi(t) \, , \, \mathbf{A}\psi(t) \rangle}$$

- Die zeitliche Entwicklung von Zuständen wird durch die **Schrödingergleichung**

$$\boxed{\mathbf{H}\,\psi(t) \; = \; -\,i\hbar\partial_t\,\psi(t)}$$

  bestimmt, wobei $\mathbf{H}$ den **Hamiltonoperator** des entsprechenden quantenmechanischen Systems darstellt.
- Wenn bei einer Messung der Observablen $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ der Eigenwert $a_n \in \mathbb{R}$ des zugehörigen selbstadjungierten Operators $\mathbf{A}$ gefunden wird, dann geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion $\psi_n \in \mathscr{H}$ über. Dieser Sachverhalt ist als **Zustandsreduktion** bekannt.

Aus den Axiomen 2 und 3 folgt, dass die möglichen Meßwerte eines selbstadjungierten Operators $\mathbf{A}$ seine Eigenwerte $E_n \in \mathbb{R}$ sind und die Wahrscheinlichkeiten durch $|c_n|^2$ gegeben sind, wobei $c_n \in \mathbb{C}$ die Entwicklungskoeffizienten von $\psi(t) \in \mathscr{H}$ nach den Eigenfunktionen von $\mathbf{A}$ sind.

$$\boxed{\psi(x,t) \; = \; \textstyle\sum_n \, c_n \, \psi_n(x) \exp\left\{ -\,i\frac{E_n}{\hbar} t \right\}}$$

Insbesonders folgt, dass das Absolutquadrat $|\psi(x,t)|^2 \in (0,1]$ die **Wahrscheinlichkeitsdichte** für die Position x zur Zeit t ist, vorausgesetzt, dass die Wellenfunktion $\psi(t) \in \mathscr{H}$ auf **eins** normiert ist.

Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte

Bewegungsgleichung: $\mathbf{H}\,\psi(t) = i\hbar\partial_t\,\psi(t)$

Zeitliche Entwicklung: $U(t) = \exp\{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t\}$

$U(t)^\dagger = U(-t)$

$\psi(t) = U(t)\,\psi(0)$

$\langle\psi(t)\,,\,\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)\,,\,\psi(0)\rangle$

Reiner Zustand:

Vollständige Information

Das System ist durch den auf 1 normierten Zustand $\psi(t)$ dargestellt.

$\psi(t) \Longleftrightarrow \mathsf{Q} = \mathsf{Q}(t) = |\,\psi(t)\rangle\langle\psi(t)\,|$

$\psi(t) =$ Lösung der Bewegungsgleichung

$\mathsf{Q} =$ Projektionsoperator

Gemischter Zustand:

Unvollständige Information

Das System ist mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten $\lambda_j : j = 1, 2, \ldots N$, wobei $0 < \lambda_j < 1$ und $\sum_{j=1}^N \lambda_j = 1$, durch die auf 1 normierten Zustände $\psi_j(t) : j = 1, 2, \ldots N$ dargestellt.

$\psi_j(t) \Longleftrightarrow \mathsf{Q}_j = \mathsf{Q}_j(t) = |\,\psi_j(t)\rangle\langle\psi_j(t)\,|$

$\psi_j(t) =$ linear unabhängige Lösungen

$\mathsf{Q}_j =$ Projektionsoperatoren

Systembeschreibung: **Dichteoperator:** $\boldsymbol{\rho}(t)$

$$\boldsymbol{\rho}(t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j\,\mathsf{Q}_j = \sum_j |\,\psi_j(t)\rangle\,\lambda_j\,\langle\psi_j(t)\,|$$

Erwartungswert: Annahme: $\mathbf{A}$ = selbstadjungierter Operator

Reiner Zustand:

$$\langle\mathbf{A}\rangle_t = \langle\psi(t)\,,\,\mathbf{A}\psi(t)\rangle \in \mathbb{R}$$

Gemischter Zustand:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{A}\rangle_t &= \sum_j \lambda_j\,\langle\psi_j(t)\,,\,\mathbf{A}\psi_j(t)\rangle \\ &= \mathit{Spur}\,(\boldsymbol{\rho}\,\mathbf{A}) \in \mathbb{R}\end{aligned}$$

Spektralzerlegung von A

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \textstyle\sum_\ell a_\ell\, \mathsf{Q}_\ell && \text{(falls reines Punktspektrum)} \\ \mathbf{A}\,\phi_{\ell s} &= a_\ell\,\phi_{\ell s} && \phi_{\ell s} = |\,\phi_{\ell s}\rangle = |\,\ell s\rangle \\ \mathsf{Q}_\ell\,\mathsf{Q}_{\ell'} &= \delta_{\ell\ell'}\,\mathsf{Q}_\ell && \mathbf{1} = \textstyle\sum_\ell \mathsf{Q}_\ell \\ \mathsf{Q}_\ell &= \textstyle\sum_{s=1}^{n_\ell} \mathsf{Q}_{\ell s} && \mathsf{Q}_{\ell s} = |\,\phi_{\ell s}\rangle\langle\phi_{\ell s}\,| \\ \dim \mathsf{Q}_\ell\,\mathscr{H} &= n_\ell && n_\ell = \text{Entartung des EW's } a_\ell \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte für reine Zustände:

Erwartungswert von **A**, wenn das Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) durch den reinen Zustand $\psi(t)$ beschrieben wird, ist der Mittelwert von Messungen an **A**, die an einer grossen ($\longmapsto \infty$) Zahl N von äquivalenten (nicht wechselwirkenden) Systemen unabhängig voneinander durchgeführt werden, wobei jedes Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) durch $\psi(t)$ dargestellt wird.

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{A}\rangle_t &= \langle\psi(t)\,,\,\mathbf{A}\,\psi(t)\rangle = \textstyle\sum_\ell a_\ell\,\langle\psi(t)\,,\,\mathsf{Q}_\ell\,\psi(t)\rangle = \textstyle\sum_\ell a_\ell\,W_\ell[\psi(t)] \\ W_\ell[\psi(t)] &= \langle\psi(t)\,,\,\mathsf{Q}_\ell\,\psi(t)\rangle = \textstyle\sum_{s=1}^{n_\ell} \,|\,\langle\psi(t)\,,\,\phi_{\ell s}\rangle\,|^{\,2} \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

$W_\ell[\psi(t)]$ = **Wahrscheinlichkeit** $W_\ell[\psi(t)]$ den EW a_ℓ (**JA** oder **NEIN**) zur Zeit t zu messen, wenn sich das Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) im Zustand $\psi(t)$ befindet $\Longrightarrow$ ***Grenzwert von relativen Häufigkeiten***

- Beachte den Unterschied zwischen dem Erwartungswert ($\langle\mathbf{A}\rangle_t \in \mathbb{R}$) und der Wahrscheinlichkeit $W_\ell[\psi(t)]$, wobei $0 \le W_\ell[\psi(t)] \le 1$, einen bestimmten Versuchsausgang (**JA** oder **NEIN**) zu erhalten.

- Beachte, die **einzigen** Werte die **A** annehmen kann (die man messen kann) sind seine **EWe** $a_\ell \in \mathbb{R}$.

- Beachte, $\langle\mathbf{A}\rangle_t$ kann negativ sein und muss auch nicht mit irgend einem seiner EW a_ℓ übereinstimmen.

- Die Wahrscheinlichkeit, dass **A** den Wert a_ℓ **oder** a_m annimmt ist durch $W_\ell[\psi(t)] + W_m[\psi(t)]$ gegeben, wenn sich das System im Zustand $\psi(t)$ befindet.

$$W_{\ell,m}[\psi(t)] = \langle\psi(t)\,,\,(\mathsf{Q}_\ell + \mathsf{Q}_m)\psi(t)\rangle = W_\ell[\psi(t)] + W_m[\psi(t)]$$

- Beachte, dass insgesamt

$$\textstyle\sum_\ell W_\ell[\psi(t)] = 1$$

gelten muss.

Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte für gemischte Zustände:

Erwartungswert von $\mathbf{A}$, wenn das Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) durch den gemischten Zustand $\boldsymbol{\rho}(t)$ beschrieben wird, ist der Mittelwert von Messungen an $\mathbf{A}$, die an einer grossen Zahl N ($\longmapsto \infty$) von äquivalenten (nicht wechselwirkenden) Systemen unabhängig voneinander durchgeführt werden, wobei jedes Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) durch $\boldsymbol{\rho}(t)$ dargestellt wird.

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{A} \rangle_t &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \, \langle \psi_j(t) \, , \mathbf{A}\psi_j(t) \rangle \;=\; \sum_\ell a_\ell \, W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] \\
W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \, \langle \psi_j(t) \, , \mathsf{Q}_\ell \, \psi_j(t) \rangle \;=\; \mathit{Spur} \, (\boldsymbol{\rho}(t) \, \mathsf{Q}_\ell) \\
&= \sum_{j=1}^N \lambda_j \sum_{s=1}^{n_\ell} \, | \langle \psi_j(t) \, , \phi_{\ell s} \rangle | \, ^2
\end{aligned}$$

$W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)]$ = **Wahrscheinlichkeit** ($0 \le W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] \le 1$) den EW a_ℓ (**JA** oder **NEIN**) zur Zeit t zu messen, wenn sich das Teilchen ($\longleftrightarrow$ System) im Zustand $\boldsymbol{\rho}(t)$ befindet $\Longrightarrow$ ***Grenzwert von relativen Häufigkeiten***

- Beachte den Unterschied zwischen dem Erwartungswert ($\langle \mathbf{A} \rangle_t \in \mathbb{R}$) und der Wahrscheinlichkeit $W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)]$, wobei $W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] \in [0,1]$ einen bestimmten Versuchsausgang (**JA** oder **NEIN**) zu erhalten.

- Beachte, die **einzigen** Werte die $\mathbf{A}$ annehmen kann (die man messen kann) sind seine **EWe** $a_\ell \in \mathbb{R}$.

- Beachte, $\langle \mathbf{A} \rangle_t$ kann negativ sein und muss auch nicht mit irgend einem seiner EW a_ℓ übereinstimmen.

- Die Wahrscheinlichkeit, dass $\mathbf{A}$ den Wert a_ℓ **oder** a_m annimmt ist durch $W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] + W_m[\boldsymbol{\rho}(t)]$ gegeben, wenn sich das System im Zustand $\boldsymbol{\rho}(t)$ befindet.

$$W_{\ell,m}[\boldsymbol{\rho}(t)] \;=\; \mathit{Spur} \, \{\boldsymbol{\rho}(t) \, (\mathsf{Q}_\ell + \mathsf{Q}_m)\} \;=\; W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] + W_m[\boldsymbol{\rho}(t)]$$

- Beachte, dass insgesamt

$$\sum_\ell W_\ell[\boldsymbol{\rho}(t)] \;=\; 1 \Longleftrightarrow \mathit{Spur} \; \boldsymbol{\rho}(t) \;=\; 1$$

gelten muss und dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens ($\longleftrightarrow$ Systems) durch den Ausdruck

$$\langle x \mid \boldsymbol{\rho}(t) \mid x \rangle \;=\; \sum_{j=1}^N \lambda_j \, \psi_j(x,t)^* \, \psi_j(x,t)$$

gegeben ist.

Unschärfe $=$ ***Mittlere quadratische Abweichung***

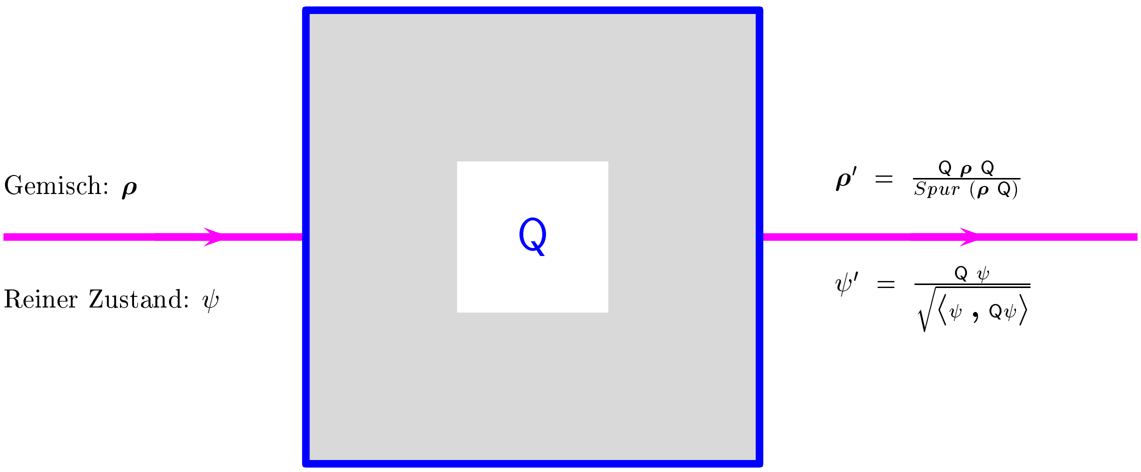
$$\Delta\mathbf{A}_t = \sqrt{\langle\mathbf{A}^2\rangle_t - \langle\mathbf{A}\rangle_t^2} =$$

mittlere quadratische Abweichung der Messergebnisse um den Mittelwert $\langle\mathbf{A}\rangle_t$

$$\Delta\mathbf{A}_t = 0 \Longleftrightarrow \psi(t) = \text{Eigenfunktion von } \mathbf{A}$$

Zustandsreduktion $=$ ***Präparative Messung***

$$\mathsf{Q}\,\mathsf{Q}^\dagger = \mathsf{Q}$$



$$W = \langle\mathsf{Q}\rangle = \left\{ \begin{array}{ll} \textbf{Gemisch:} & Spur\ (\boldsymbol{\rho}\ \mathsf{Q}) \\ \textbf{Reiner Zustand:} & \langle\psi(t)\ ,\ \mathsf{Q}\ \psi(t)\rangle \end{array} \right\} =$$

$=$ **Wahrscheinlichkeit**, dass ein Teilchen, das in diesen Apparat ($\longleftrightarrow$ Q) eintritt auch wieder austritt