V Prinzipien der Quantenmechanik

1 Messwerte und Messprozess

- **Diskretes Spektrum**
  Die Observable $\hat{A}$ besitzt ein vollständiges Spektrum von Eigenfunktionen

$$\hat{A}\,|\varphi_n\rangle = a_n\,|\varphi_n\rangle\,. \tag{V.1}$$

Sei nun das Spektrum ein Zustand $|\Psi\rangle$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n\,|\varphi_n\rangle \;\text{ mit } c_n = \langle\varphi_n|\Psi\rangle \tag{V.2}$$

$$\text{und } \sum_n |c_n|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle = \mathbb{1} \tag{V.3}$$

$$\Rightarrow \text{Mittelwert}\langle A\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \sum_n a_n|c_n|^2 \tag{V.4}$$

Die einzig möglichen Ergebnisse der Messung der Observablen $\hat{A}$ sind die Eigenwerte a_n. Die Wahrscheinlichkeit, einen nicht-entarteten Eigenwert a_n in $|\Psi\rangle$ zu messen ist

$$P(a_n) = |\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2. \tag{V.5}$$

Es gilt

$$\sum_n P(a_n) = 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle \tag{V.6}$$

- **Streuung (Varianz) der Messwerte**

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \tag{V.7}$$

$$= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \tag{V.8}$$

$$\Rightarrow \mathit{mit}\,|\Psi\rangle = \sum c_n\,|\varphi_n\rangle \;\text{ dass} \tag{V.9}$$

$$(\Delta A)^2 = \sum_n a_n^2|c_n|^2 - \Big(\sum_n a_n|c_n|^2\Big)^2 \tag{V.10}$$

$$= \begin{cases} 0, \;\text{ für } c_n = \delta_{n,m}, \text{d.h. } |\Psi\rangle = |\varphi_k\rangle \\ > 0\;,\text{ sonst} \end{cases} \tag{V.11}$$

Interpretation: Wenn eine Messung von A tatsächlich stattfindet, dann erhalten wir einen der möglichen Eigenwerte a_n. Unmittelbar nach der Messung **wissen** wir, welcher Messwert tatsächlich erhalten wurde. Somit ist nach der Messung der Zustand des Systems $\neq |\Psi\rangle$ von der Messung. Nach der Messung von a_k befindet sich das System im Zustand $|\varphi_n\rangle$:

$$\text{Messung: } |\Psi\rangle \xrightarrow{a_n} |\varphi_n\rangle$$

Das nennen man *Reduktion* (Kollaps) der Wellenfunktion.
In der QM gibt es daher zwei Arten von Zustandsveränderungen:

(i) Nicht beobachtetes System: Aus der Schrödingergleichung folgt

$$t = 0 : |\Psi(0)\rangle \to |\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\Psi(0)\rangle$$

Die Zustandsgleichung ist deterministisch und reversibel [$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ ist unitär].
Eine Messung zum Zeitpunkt t liefert Messwerte a_k mit Wahrscheinlichkeit $P_t(a_k) = |\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2$.

(ii) Messung und Reduktion
Wird die Messung zum Zeitpunkt t ausgeführt und a_k gemessen, dann ist

$$\text{Messung: } |\Psi(t)\rangle \xrightarrow{a_k} |\varphi_n\rangle$$

stochastisch und irreversibel.
Eine Messung von A mit Ergebnis a_k präpariert $|\Psi\rangle$ in $|\varphi_n\rangle$: eine sofort durchgeführte zweite Messung ergibt mit Wahrscheinlichkeit 1 wieder a_k

- **Beispiel: Harmonischer Oszillator**
Zum Zeitpunkt $t = 0$ präparieren wir das System im initialen Zustand

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\varphi_0\rangle + |\varphi_1\rangle\Big) \tag{V.12}$$

$$\text{mit } \hat{H}\,|\varphi_n\rangle = \mathrm{E}_n\,|\varphi_n\rangle\,. \tag{V.13}$$

Die Zeitentwicklung à la Schrödinger für $t > 0$ schreibt sich dann

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(e^{-i\mathrm{E}_0 t/\hbar}\,|\varphi_0\rangle + e^{-i\mathrm{E}_1 t/\hbar}\,|\varphi_1\rangle\Big). \tag{V.14}$$

Die Wahrscheinlichkeit, bei t_r den Eigenwert E_n zu messen ist

$$P(\mathrm{E}_n) = |\langle\varphi_n|\Psi(t)\rangle|^2 \text{ d.h.} \tag{V.15}$$

$$P(\mathrm{E}_0) = \frac{1}{2} = P(\mathrm{E}_1) \quad P(\mathrm{E}_{n>1}) = 0 \tag{V.16}$$

Der Energieerwartungswert ist

$$\langle H\rangle_{t_r} = \frac{1}{2}\mathrm{E}_0 + \frac{1}{2}E_1 \quad \text{Mittelwert} \tag{V.17}$$

Unmittelbar nach der Messung mit dem Ergebnis E_1 befindet sich das System im Zustand $|\varphi_1\rangle$. Zeitentwicklung:

$$|\Psi(t)\rangle_{t>t_r} = e^{-i\mathrm{E}_2 t/\hbar}\,|\varphi_1\rangle \tag{V.18}$$

- Dieses Prinzip lässt sich entsprechend erweitern auf ein diskret entartetes Spektrum, mit

$$A\left|\varphi_n^i\right\rangle = a_n\left|\varphi_n^i\right\rangle \quad i = 1,\ldots,g_n \tag{V.19}$$

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n}\left|{}^i_n\right\rangle\left\langle\varphi_n^i\right|, \tag{V.20}$$

wobei P_n der Projektor auf den Unterraum h_n ist.
→ Die Wahrscheinlichkeit, einen g_n-fach entarteten Eigenwert a_n im Zustand $|\Psi\rangle$ zu messen, ist

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n}\left|\left\langle\varphi_n^i\middle|\Psi\right\rangle\right|^2 = \|\,|P_n\Psi\rangle\,\|^2 \tag{V.21}$$

Der Zustand wird dementsprechend reduziert auf

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{a_k} \frac{P_n\,|\Psi\rangle}{\|P_n\,|\Psi\rangle\,\|} \tag{V.22}$$

- **Erweiterung auf kontinuierliches Spektrum** $\sum_n \to \int \mathrm{d}\alpha$
Beispiel: Impulsmessung

$$\langle x|p\rangle = v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \tag{V.23}$$

$$\hat{p}v_p(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}v_p(x) \tag{V.24}$$

$$= pv_p(x) \tag{V.25}$$

(Messwerte: $-\infty < p < +\infty$) Die Wahrscheinlichkeit p um dp zu messen ist

$$\mathrm{d}P = |\langle P|\Psi\rangle|^2\mathrm{d}p = \left|\tilde{\Psi}(p)\right|^2\mathrm{d}p \tag{V.26}$$

wobei $\Psi\tilde{(p)}$ die Fourier Trafo von $\Psi(x)$ ist.

- **Messung vertauschbarer Observablen:**

Seien $\hat{A}, \hat{B}$ definiert als

$$\hat{A} = \sum_n a_n \left|n\right\rangle \left\langle n\right| ; \quad P_n = \left|n\right\rangle \left\langle n\right| \tag{V.27}$$

$$\hat{B} = \sum_\nu b_\nu \left|\nu\right\rangle \left\langle \nu\right| ; \quad P_\nu \left|\nu\right\rangle \left\langle \nu\right| \tag{V.28}$$

(nicht entartet). Durch die Messung von $\hat{A}$ ist der Zustand nach der Messung

$$\left|\Psi_n\right\rangle = \frac{P_n \left|\Psi\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \Psi|P_n|\Psi\right\rangle}}. \tag{V.29}$$

Anschließend wird sofort $\hat{B}$ gemessen:

- Wahrscheinlichkeit b_ν zu messen, wenn vorher a_n gemessen wurde (bedingte Wahrscheinlichkeit):

$$P(b_\nu|a_n) = \left\langle \Psi_n|P_\nu|\Psi_n\right\rangle \tag{V.30}$$

$$= \frac{\left\langle \Psi|P_n P_\nu P_n|\Psi\right\rangle}{\left\langle \Psi|\Psi_n|\Psi\right\rangle} \tag{V.31}$$

- Wahrscheinlichkeit erst a_n, dann b_ν zu messe (Verbundwahrscheinlichkeit):

$$P(b_\nu, a_n) = P(b_\nu|a_n) \cdot P(a_n) \tag{V.32}$$

$$\text{auch } P(a_n, b_\nu) = P(a_n|b_\nu) \cdot P(b_\nu) \tag{V.33}$$

$$\neq P(b_\nu, a_n). \tag{V.34}$$

Aber für $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ gilt

$$[P_n, P_\nu] = 0 \tag{V.35}$$

$$P(b_\nu, a_n) = P(a_n, b_\nu). \tag{V.36}$$

2 Heisenbergsche Unschärferelation

Seien $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesche Operatoren (d.h. Observablen), dann sind

$$\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle; \quad \delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle \tag{V.37}$$

ebenfalls hermitesch. Für die Varianzen ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 &= \langle\Psi|\delta\hat{A}^2|\Psi\rangle\ \langle\Psi|\delta\hat{B}^2|\Psi\rangle && \text{(V.38)}\\
&= \left\langle\delta\hat{A}\Psi\middle|\delta\hat{A}\Psi\right\rangle \left\langle\delta\hat{B}\Psi\middle|\delta\hat{B}\Psi\right\rangle && \text{(V.39)}\\
&= \langle\Psi_{\delta A}|\Psi_{\delta A}\rangle\ \langle\Psi_{\delta B}|\Psi_{\delta B}\rangle && \text{(V.40)}\\
&\geq |\langle\Psi_{\delta A}|\Psi_{\delta B}\rangle|^2 \quad \text{(Schwarzsche Ungleichung)} && \text{(V.41)}\\
&= \langle\Psi|\delta A\delta B|\Psi\rangle\ \langle\Psi|\delta B\delta A|\Psi\rangle && \text{(V.42)}
\end{aligned}$$

Nun ist

$$\delta\hat{A}\delta\hat{B} = \frac{\delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A}}{2} + i\ \frac{\delta\hat{A}\delta\hat{B} - \delta\hat{B}\delta\hat{A}}{2i}. \tag{V.43}$$

Definiert man

$$X_+ = \frac{\delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A}}{2} \tag{V.44}$$

$$\text{bzw. } X_- = \frac{\delta\hat{A}\delta\hat{B} - \delta\hat{B}\delta\hat{A}}{2i} \tag{V.45}$$

kann man zeigen, dass

$$\begin{aligned}
&\langle X_+ + X_-\rangle\langle X_+ - iX_-\rangle && \text{(V.46)}\\
&= \langle X_+\rangle^2 - i\langle X_+\rangle\langle X_-\rangle + i\langle X_+\rangle\langle X_-\rangle + \langle X_-\rangle^2 && \text{(V.47)}\\
&= \langle X_+\rangle^2 + \langle X_-\rangle^2 && \text{(V.48)}
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi|\delta\hat{A}\delta\hat{B}|\Psi\rangle\ \langle\Psi|\delta\hat{B}\delta\hat{A}|\Psi\rangle && \text{(V.49)}\\
&= \left(\frac{\langle\delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A}\rangle}{2}\right)^2 + \left(\frac{\langle\delta\hat{A}\delta\hat{B} - \delta\hat{B}\delta\hat{A}\rangle}{2i}\right)^2 && \text{(V.50)}\\
&= \left(\frac{\langle\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}\rangle}{2} - \langle A\rangle\langle B\rangle\right)^2 + \langle\frac{\overbrace{\langle AB - BA\rangle}_{\in\mathbb{R}}}{2i}\Big)^2 && \text{(V.51)}\\
&\geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2 && \text{(V.52)}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle| \tag{V.53}$$

Ersetzen wir $\hat{A} = \hat{x},\ \hat{B} = \hat{p}$, sp erhalten wir

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{V.54}$$

Zwei nicht-kommutierende Operatoren sind nicht gleichzeitig scharf messbar!

3 Translationsoperatoren

Seien $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesche Operatoren mit $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$ und

$$\hat{A}\,|a\rangle = a\,|a\rangle\,; \quad \hat{B}\,|b\rangle = b\,|b\rangle \tag{V.55}$$

mit kontinuierlichem Spektrum (z.B. $\hat{x}, \hat{p}$).

$$\Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}\;\hat{A}\;e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha} = \hat{A} + \alpha; \quad \alpha \in \mathbb{R} \tag{V.56}$$

Nämlich

$$f(\alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}\;\hat{A}\;e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha} \tag{V.57}$$

$$\frac{\mathrm{d}f(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}\;[\hat{B}, \hat{A}]\;e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha} \tag{V.58}$$

$$= 1 \quad \text{mit f(0)} = \hat{A} \tag{V.59}$$

$$\Rightarrow f(\alpha) = \hat{A} + \alpha \tag{V.60}$$

Somit gilt auch

$$[\hat{A}, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}] = \hat{A}\;e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha} - e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}\hat{A} \tag{V.61}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}(\hat{A} + \alpha) - e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha}\hat{A} \tag{V.62}$$

$$= \alpha\;e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{B}\alpha} \tag{V.63}$$

4 Zeitentwicklung von Mittelwerten und Bilder der Dynamik

Im Folgenden wollen wir uns die zeitliche Entwicklung von

$$\langle A(t)\rangle = \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle \tag{V.64}$$

anschauen.

(i) Für die zeitliche Ableitung gilt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A(t)\rangle = \left\langle \dot{\Psi}(t) \middle| A \middle| \Psi(t) \right\rangle + \langle \Psi(t)|\dot{A}|\Psi(t)\rangle + \left\langle \Psi(t) \middle| A \middle| \dot{\Psi}(t) \right\rangle \tag{V.65}$$

$$= \langle \Psi(t)| -\frac{1}{i\hbar} HA + A\frac{1}{i\hbar}H + \dot{A}|\Psi(t)\rangle \tag{V.66}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle [H,A]\rangle + \langle \frac{\partial}{\partial t}A\rangle, \tag{V.67}$$

da aus der Schrödingergleichung

$$-i\hbar \left\langle \dot{\Psi} \right| = \langle \Psi |\, H \tag{V.68}$$

folgt. Dies gilt auch für zeitabhängige H.

(ii) Sei

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r}) \tag{V.69}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle r_l\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, r_l]\rangle \tag{V.70}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle [\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}, r_l]\rangle \tag{V.71}$$

$$= \sum_k \langle \frac{i}{\hbar}\frac{p_k}{2m}[p_k, r_l] + [p_k, r_l]\frac{i}{\hbar}\frac{p_k}{2m}\rangle \tag{V.72}$$

$$= \langle \frac{p_l}{m}\rangle \tag{V.73}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \vec{r}\rangle = \langle \frac{\vec{p}}{m}\rangle \tag{V.74}$$

$$\tag{V.75}$$

Außerdem haben wir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_l\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [V(\vec{r}, p_l]\rangle \tag{V.76}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle i\hbar\vec{\nabla}_l V(\vec{r})\rangle = -\langle \vec{\nabla}_l V(\vec{r})\rangle \tag{V.77}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \vec{p}\rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{r})\rangle\,. \tag{V.78}$$

$$\tag{V.79}$$

Das bedeutet, dass die Mittelwerte sich entwickeln nach den klassischen Bewegungsgleichungen (Ehrenfestsches Theorem). Aber, ganz wichtig:

$$\langle \vec{\nabla}\ V(\vec{r})\rangle \neq \vec{\nabla}\ V(\langle \vec{r}\rangle)\ \ ! \tag{V.80}$$

(iii) Hat eine Observable keine explizite Zeitabhängigkeit **und** kommutiert mit H, d.h.

$$\frac{\partial}{\partial t} A = 0, \quad [A, H] = 0\,, \tag{V.81}$$

dann folgt

$$\Rightarrow \text{A ist eine Konstante der Bewegung (eine Erhaltungsgröße)} \tag{V.82}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle A \rangle = 0 \tag{V.83}$$

Da $[A, H] = 0$, existiert ein gemeinsames Eigenfunktionssystem.

5 Darstellungen (Bilder) der Zeitentwicklung

Neben der bisherigen Darstellung

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\Psi(t)\rangle = H\, |\Psi(t)\rangle\,, \tag{V.84}$$

der sog. Schrödingerdarstellung, existieren noch andere Darstellungen der Zeitentwicklung in der Quantenmechanik.

(i) Heisenbergbild: Hier bleiben die Zustandsvektoren zeitunabhängig und bestimmt durch ihre Anfangswerte.
Nach Schrödinger hat man zunächst den formalen Ausdruck

$$|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar} H (t - t_0)}\, |\Psi(t_0)\rangle \tag{V.85}$$

und damit

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle\,. \tag{V.86}$$

Im Heisenbergbild (Heisenbergdarstellung) wird diese Zeitabhängigkeit auf die Operatoren abgewälzt:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} Ht}\, A\, e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} | \Psi(0) \rangle \tag{V.87}$$

$$\Rightarrow A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht}\, A_S\, e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}\,, \tag{V.88}$$

wobei wir den Operator im Schrödingerbild zur Unterscheidung mit A_S bezeichnet haben.

Die Dynamik spielt sich damit auf der Ebene der Operatoren ab entsprechend der sog. Heisenberggleichung

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H, A_H(t)] + (\dot{A}_S)_H \tag{V.89}$$

$$\tag{V.90}$$

mit $(\dot{A}_S)_H = \mathrm{e}^{iHt/\hbar}\,\dot{A}_S\,\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$ falls eine explizite Zeitabnhängigkeit von $A_S(t)$ vorliegt. Sie bestimmt die Dynamik aller Erwartungswerte, so wie die Schrödingergleichung im Schrödingerbild.

(ii) Wechselwirkungsbild
Oftmals hat man ein Hamiltonoperator der Form $H = H_0 + W$ mit einem "einfachen" (lösbaren) Teil H_0 und einer Störung W. Um diese approximativ am besten erfassen zu können (Störungsentwicklung), geht man ins Wechselwirkungsbild

$$|\Psi_W(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,|\Psi_S(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,|\Psi_S(0)\rangle \tag{V.91}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\Psi_W(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\,H_0\;|\Psi_W(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\;H\;e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}}_{H_W(t)}|\Psi_W(t)\rangle \tag{V.92}$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\;\underbrace{[H_W(t) - H_0(t)]}_{W_W(t)}\;|\Psi_W(t)\rangle \tag{V.93}$$

$$\tag{V.94}$$

Die Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild folgt somit aus

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\Psi_W(t)\rangle = W_W(t)\;|\Psi_W(t)\rangle \tag{V.95}$$

mit Operatoren

$$A_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\;A\;e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tag{V.96}$$

$$= U_W(t)^\dagger\,A_H(t)\,U_W(t), \tag{V.97}$$

$$\tag{V.98}$$

wobei

$$U_W(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\;\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{V.99}$$

der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild ist. Durch diese gemischte Zeitabhängigkeit für Operatoren und Zustände erhält man eine Schrödingergleichung, die nur noch den Wechselwirkungsanteil W entält, allerdings in zeitabhängiger Form entsprechend der ungestörten Situation.

Für die zeitliche Ableitung gilt dann

$$i\hbar\dot{U}(t) = H_W(t)\, U(t) - H_0(t)\, U(t) \tag{V.100}$$

$$\Rightarrow i\hbar\dot{U}(t) = W_W(t)\, U(t) \tag{V.101}$$

mit $H_{0,W} = H_0$ sowie

$$U(t) = \underbrace{U(0)}_{=\mathbb{1}} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathrm{d}s\; W_W(s)U(s). \tag{V.102}$$

Gleichung V.102 ist eine iterative Gleichung zur Bestimmung von $U(t)$.

$$\Rightarrow U(t) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\; W_W(t') \tag{V.103}$$

$$+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t \mathrm{d}t'\; W_W(t') \int_0^{t'} \mathrm{d}t''\; W_W(t'') \tag{V.104}$$

$$+ \dots \tag{V.105}$$

$$\tag{V.106}$$

Durch Definition eines sog. Zeitordnungsoperators lässt sich diese Reihe formal aufsummieren, d.h.,

$$\mathcal{T}[A(t)\; B(t')] = A(t)B(t')\theta(t-t') \tag{V.107}$$

$$+ B(t')\; A(t)\theta(t'-t)\,, \tag{V.108}$$

so dass

$$\int_0^t \mathrm{d}t'\; W_W(t') \int_0^{t'} \mathrm{d}t'' W_W(t'') \tag{V.109}$$

$$= \frac{1}{2}\,\mathcal{T} \int_0^t \mathrm{d}t' \int_0^t \mathrm{d}t''\; W_W(t')\; W_W(t'') \tag{V.110}$$

$$\Rightarrow U(t) = \mathcal{T}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\; W_W(t')\right\} \tag{V.111}$$

6 Superposition, Interferenz, Dichteoperatoren

(i) Seien $|\Psi_1\rangle\,, |\Psi_2\rangle$ normierte Zustände mit $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0$ und die Observable A gegeben durch

$$A = \sum_n a_n\, |n\rangle\, \langle n|\,, \tag{V.112}$$

dann gilt

$$P_1(a_n) = |\langle n|\Psi_1\rangle|^2 \tag{V.113}$$
$$P_2(a_n) = |\langle n|\Psi_2\rangle|^2. \tag{V.114}$$

Ebenso gilt für die lineare Superposition

$$|\Psi\rangle = \lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle \tag{V.115}$$
$$\text{mit } |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1 \Rightarrow P(a_n) = |\langle n|\Psi\rangle|^2 = |\lambda_1 \langle n|\Psi_1\rangle + \lambda_2 \langle j|\Psi_2\rangle|^2 \tag{V.116}$$
$$= |\lambda_1|^2 \, P_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \, P_2(a_n) \tag{V.117}$$
$$+ \underbrace{2Re\{\lambda_1\lambda_2^* \langle n|\Psi_1\rangle \langle\Psi_2|n\rangle\}}_{\text{Interferenz}} \tag{V.118}$$

Die Addition der Zustandsvektoren entspricht der Addition von Wellenamplituden → Interferenz ≠ Addition der individuellen Wahrscheinlichkeiten (Basisabhängig!).

(ii) **Dichteoperator**

Wir führen nun den Dichteoperator für gemischte Zustände ein und stellen diesen in der Basis der Observablen A dar:

$$\rho = \sum_n p_n |n\rangle \langle n| \quad \text{mit } p_n \in \mathbb{R}^+ . \tag{V.119}$$

Dieser Operator lässt sich nicht als sog. "reiner" Zustand $\rho \neq |\Psi\rangle \langle\Psi|$ darstellen. Für den Erwartungswert gilt dann

$$\langle A\rangle = \text{Spur}\{A\rho\} \tag{V.120}$$
$$= \sum_k \langle k|A\rho|k\rangle \tag{V.121}$$
$$= \sum_k a_k p_k \tag{V.122}$$

Allgemein gilt für Dichteoperatoren

$$\text{Spur}(\rho) = \sum_n p_n = 1 \Rightarrow 0 \leq p_n \leq 1 \tag{V.123}$$
$$\text{Spur}(\rho^2) = \sum_k p_k^2 \begin{cases} < 1, & \text{Zustand gemischt} \\ = 1, & \text{reiner Zustand } p_n = \delta_{n,k} \end{cases} \tag{V.124}$$

Da außerdem $p_n \in \mathbb{R}$ gilt

$$\rho = \rho^\dagger \tag{V.125}$$

Dichteoperatoren sind somit hermitesch, positiv (alle Eigenwerte > 0), normiert und beschreiben in der Regel ein Gemisch.