

Vorlesung 6:

Roter Faden:

Schrödingergleichung als Wellengleichung
der Materie

Messungen in der Quantenmechanik

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Einteilung der Vorlesung

VL1. Einleitung

Die fundamentalen Bausteine und Kräfte der Natur

VL2. Experimentelle Grundlagen der Atomphysik

2.1. Masse, Größe der Atome

2.2. Elementarladung, spezifische Ladung des Elektrons

2.3 Massenspektroskopie

2.4. Struktur der Atome, Rutherford-Streuversuch

VL3. Photonen (Quanteneigenschaften des Lichts I)

3.1. Photoeffekt

3.2. Comptoneffekt

VL4. Photonen (Quanteneigenschaften des Lichts II)

4.1. Gravitationseffekte des Photons

4.2. Temperaturstrahlung

VL5. Materiewellen (Welleneigenschaften von Teilchen)

5.1. Beugung und Interferenz von Elektronen

5.2. Materiewellen und Wellenpakete

5.3. Heisenbergsche Unschärferelation

Einteilung der Vorlesung

VL6. Elemente der Quantenmechanik I

- 6.1. Schrödingergleichung als Wellengleichung der Materie
- 6.2. Messungen in der Quantenmechanik

VL7. Elemente der Quantenmechanik II

- 7.1. Wellenpakete als Lösungen der Schrödingergleichung
- 7.2. Lösungen der Schrödingergleichung in einem Potentialfeld

Welle – Teilchen Dualismus

**Jede Welle (Licht, Schall, etc ...) zeigt Teilcheneigenschaften
(Photonen, Phononen etc ...)**

**Jedes Teilchen (Elektron, Atom etc ...) zeigt Welleneigenschaften
(deBroglie Wellen, Beugung, Interferenz)**

**Welle: Wellenlänge, Frequenz, Dispersion
 Superposition, Interferenz**

Teilchen: Impuls, Energie, Stoss, ‘Klick‘

- **Wellenpaket**
- **Interferenz**
- **Tunneleffekt, Quantenreflexion**
- **Grundzustandsenergie in Potential**
- **Licht: Lichtdruck, Photoeffekt, Comptoneffekt**

**Materiewellen (nicht relativistisch) werden mit der
Schrödingergleichung beschrieben**

Die Schrödingergleichung - Eine "Herleitung"

http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC3/Kap_II/Schroedinger_Herleitung.htm

Ebene Welle:

$$\phi = Ae^{-i\omega t + ikx} \text{ mit } k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Oder

$$\psi = Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x}$$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$p = h/\lambda = \hbar k$$

Es gilt:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar} \cdot Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x} \rightarrow (i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t})\psi = E\psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \cdot Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x} \rightarrow (\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})\psi = p\psi$$

D.h. Ableitung der Wellenfkt. nach der Zeit $\rightarrow E\psi$
 und Ableitung der Wellenfkt. nach dem Ort $\rightarrow p\psi$
 Dies ergibt offensichtlich Operatoren für E und p.

Energie	E	\rightarrow	$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}$	Energieoperator $\equiv \mathbf{H}$
Impuls	p	\rightarrow	$\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$	Impulsoperator $\equiv \mathbf{p}$
Ort	x	\rightarrow	x	
zur Kennzeichnung von Operatoren verwenden wir fette Symbole				

Schrödingergleichung

Rezept zur Herleitung der Schrödingergleichung:
Multiplizieren wir die Gesamtenergie $E = p^2/2m + V(x)$ mit Ψ :

$$\frac{p^2}{2m} \psi + V(x) \psi = E \psi$$

Ersetzen wir E und p durch die Operatoren ergibt:

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung
(eindimensionaler Fall)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

Hamilton Operator **Laplace Operator**

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad \text{in 3-D}$$

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung
(dreidimensionaler Fall, Kurzschreibweise)

$$\mathbf{H} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

Lösung der Schrödingergleichung

Lösung für zeitunabhängiges Potential:

$$E / \hbar = \omega$$

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_u(x, y, z) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Einsetzen in:

$$\mathbf{H} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

und

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_u \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}) = E \cdot \psi_u \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

ergibt:

$$\mathbf{H} \psi_u = E \psi_u$$

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \quad \text{Laplace Operator} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Dies ist die Wellengleichung für nicht-relativistische Teilchen der Masse m .
Wichtig für stationäre Probleme wie Atome! (werden nur die zeitunabh. SG benutzen!) Zeitabh. Lösung durch Multiplikation mit $\exp(-i\omega t)$ (wie oben)

Aufenthaltswahrscheinlichkeit= $|\Psi|^2 dV$

Max Born schlug 1926 vor, dass, wie bei einer elektromagn. Welle, die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen vorzufinden, gegeben wird durch die Energiedichte, d.h. das Quadrat der Amplitude der Welle oder $|\Psi|^2 dV$ ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen dV zu finden (und das Integral über dV ist natürlich 1, da das Teilchen irgendwo sein muss).

Schrödinger hat eine Wellengleichung $\Psi(x,t)$ für Teilchen mit Masse m aus der Energie der Teilchen postuliert (nicht rel.)

Problem: was ist mit Ort, Impuls oder Energie DIREKT nachdem gemessen wurde?? Dann KENNE ich z.B. den Ort, wodurch sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf 1 erhöht hat! Dies muss sich widerspiegeln in der Amplitude der Wellenfkt, d.h. Wellenfkt. muss sich ändern durch eine Messung. Dieser „Kollaps“ der Wellenfkt auf eine feste Wahrscheinlichkeit wird in der QM durch Operatoren bewirkt, d.h. jede Messung ist verbunden mit einem bestimmten Operator!

Lösung der SG

Beachte: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist unabhängig von t:

$$\int |\Psi|^2 dV \equiv \int \Psi^* \Psi dV = \int \varphi \exp(+i \frac{E_n t}{\hbar}) \varphi \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}) dV = \int \varphi^* \varphi dV = \int |\varphi|^2 dV$$

(unabhängig von t!)

Es gibt stationäre Lösungen!

Kurzschreibweise nach Dirac:

$$\text{Bracket } \langle \varphi | \varphi \rangle = \int \varphi^2 dV$$

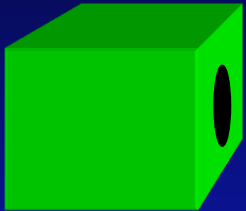
$|\varphi\rangle$ = ket-Vektor

$\langle \varphi|$ = Bra-Vektor (mit komplex konj. von φ)

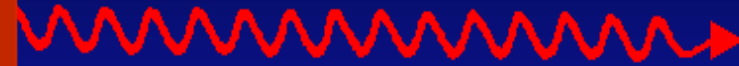
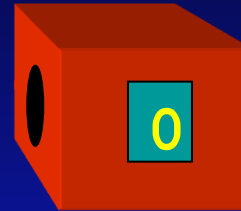
6.2. Messungen in der Quantenmechanik

Quantenmechanik als statistische Theorie

Anfangszustand



Messung



1000100101100110101001100101110101000100100100110

$$p(1) \approx \frac{22}{49}$$

$$p(0) \approx \frac{27}{49}$$

**QM sagt nur etwas über Wahrscheinlichkeiten aus.
Keine verbindliche Vorhersagen wie in der Klass.Mechanik!**

Messung und Interferenz

Doppelspalt Experiment

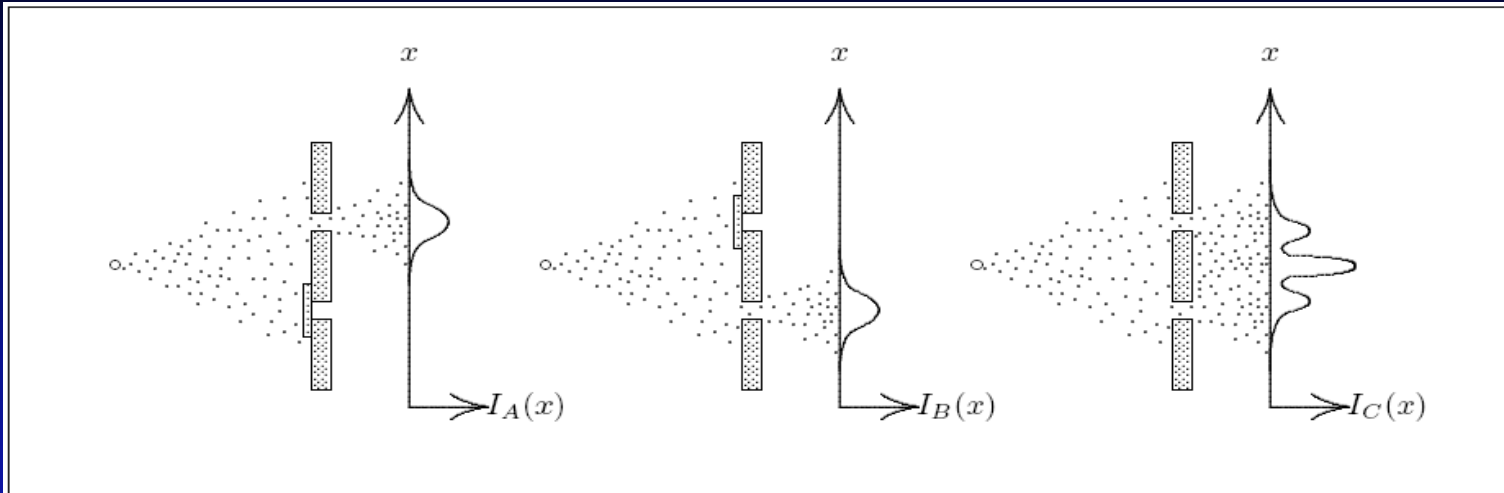


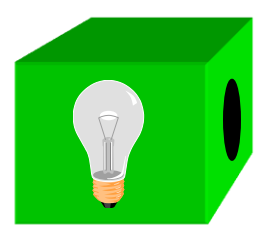
Abbildung 1.15: Das Experiment am Doppelspalt mit Elektronen.

- Im Doppelspalt Experiment gilt das **Wellenbild** (Interferenz).
- Der Nachweis des Teilchens erfolgt im **Teilchenbild**.
- Experiment mit einzelnen Teilchen (immer nur ein Teilchen zwischen Quelle und Detektor)

Frage:

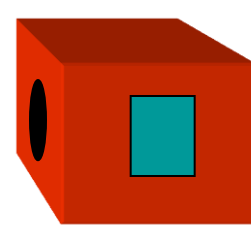
- Was passiert mit der Interferenz wenn wir die **Frage nach dem Weg** des Teilchen stellen:

Durch welchen Spalt ist das Teilchen gegangen?



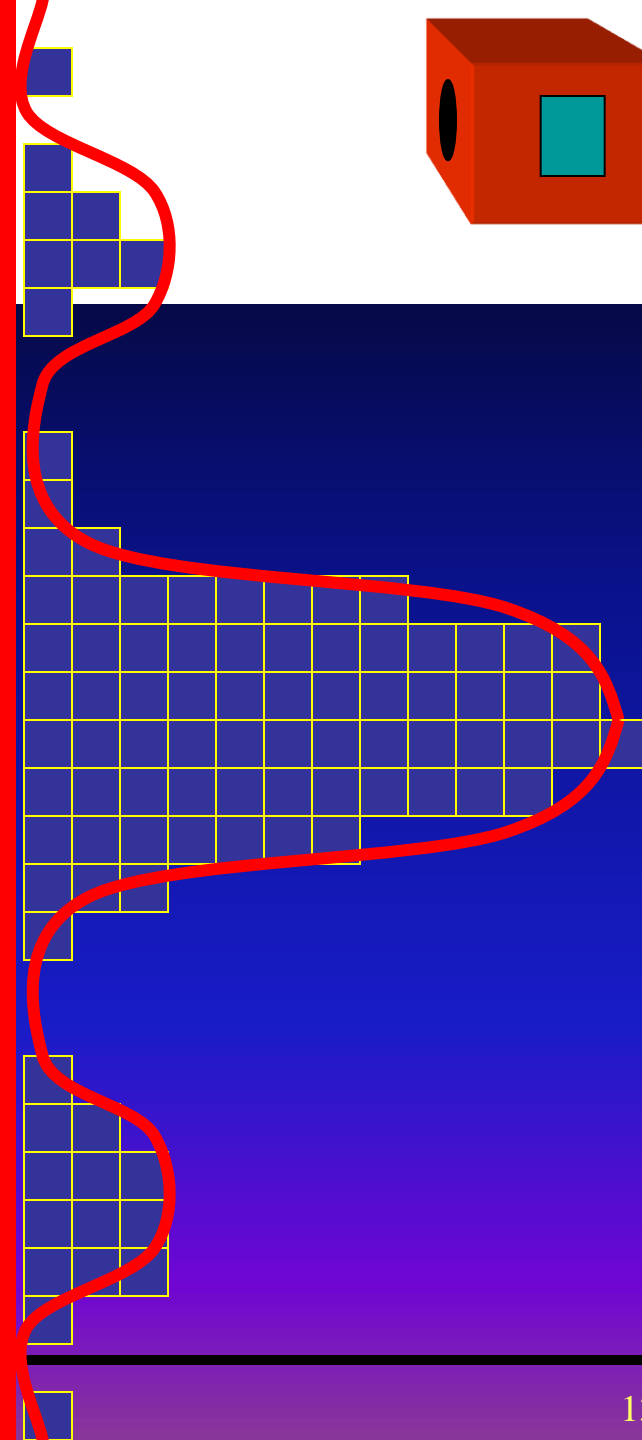
Doppelspalt

Experiment mit **einzelnen Teilchen**



**Verteilung der einzelnen Teilchen folgt Interferenz Bild!
Interferenzerscheinungen durch Unkenntnis des Weges.**

Interferenzbild hängt nicht von der Intensität ab, d.h. Ich brauche nicht 2 Elektr. gleichzeitig! EIN Elektr. ist schon eine Welle.

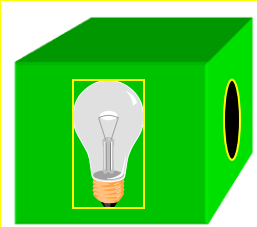


Quanten Mechanik:

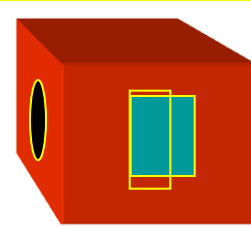
löse die Wellengleichung

Intensität

Interferenz



Ermittlung des Weges



Experimenteller Befund:
Wenn man versucht den Weg des
Elektrons zu ermitteln,
-z.B. durch Comptonstreuung
von Laserlicht bei Spalt 1 -
dann verschwindet die
Interferenz!

**D.h. Experiment erzeugt so
starke Phasen- oder Orts-
oder Impulsunschärfe, dass die
Interferenzerscheinungen
verschwinden!**

$h\nu$



$h\nu'$

Summe

Linearität, Superposition, Interferenz

2-Zustands-System

Quantenmechanik (Schrödingergleichung) ist linear.
Beliebige Überlagerungen = Superpositionen von Lösungen sind gleichwertige Lösungen.

Daher: Ein Quantensystem kann nicht nur in 'Eigenzuständen' sondern auch in allen möglichen Superpositionen sein.
Direkte Folge der Superposition: Interferenz

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle$$

with

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Das einfachste Beispiel um Superpositionen zu studieren ist ein 2-Zustands-System

Polarisation: Horizontal, Vertikal :

45° Polarisation:

Gleiche Beiträge von V und H

$$|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle + |V\rangle)$$
$$|-45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - |V\rangle)$$

Doppelspalt: Superposition der Zustände
+ Teilchen geht durch Spalt 1
+ Teilchen geht durch Spalt 2

(links)
(rechts)

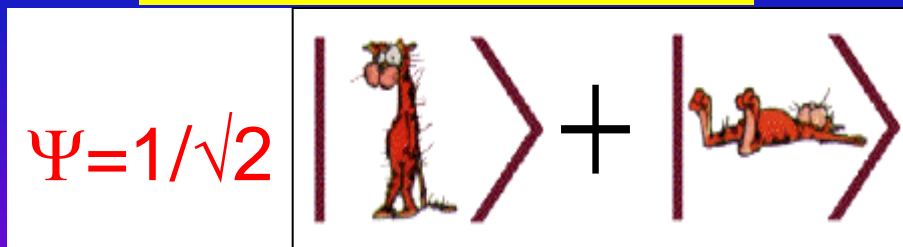
$$|L\rangle, |R\rangle$$

Überlagerung ergibt Interferenz

Schrödingers Katze

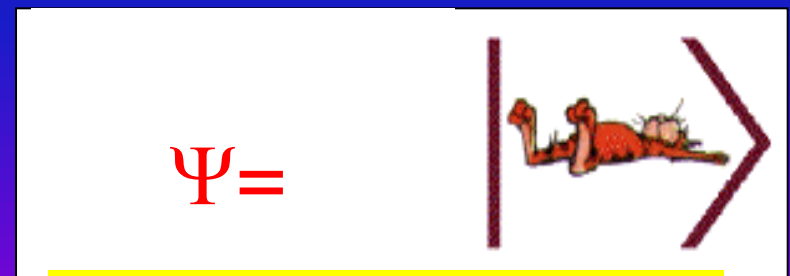
Schrödingers Katze ist ein beliebtes Beispiel um ein Phänomen anschaulich darzustellen, das in der Quantenmechanik als „Überlagerung von Zuständen“ bekannt ist. Und zwar wird bei diesem Gedankenexperiment eine Katze in eine undurchsichtige Kiste gesteckt, zusammen mit einer Apparatur, die, gesteuert von radioaktivem Zerfall, die Katze innerhalb von einer Stunde mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% bewusstlos macht. Die Frage ist nun, in welchem Zustand sich die Katze nach einer gewissen Zeit befindet, wenn man *nicht* in die Kiste hineinschaut - analog zur Frage nach dem quantenmechanischen Zustand eines Systems, solange man keine Messung an ihm vornimmt. Erst wenn man die Kiste öffnet, manifestiert sich der Zustand in einer 100% bewussten oder 100% bewusstlosen Katze.

Vor Messung oder nach langer Wartezeit:



Superposition von Zuständen

Direkt nach Messung:



Kollaps der Wellenfunktion

Eigenwerte und Eigenfunktionen

Eigenfunktionen beschreiben Eigenzustände, d.h. physikalisch mögliche Zustände, die durch messbare Größen, den Eigenwerten, charakterisiert werden.

Allgemeine Eigenfunktionsgleichung: $\hat{O} \Psi = O \Psi$ (\hat{O} = Operator, O = Eigenwert)
Operator anwenden entspricht der Durchführung einer Messung.

→ Kollaps der Wellenfunktion auf Eigenfunktion, z.B. Schrödingers Katze:

$$\Psi_K = c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} \rightarrow \hat{O} \Psi_K = \Psi_b \text{ oder } \hat{O} \Psi_K = \Psi_{nb}$$

(↔ Messung durchführen = "gucken" → Eigenfunktion Ψ_b oder Ψ_{nb} .)

Grundpostulat der Quantenmechanik:

Messungen und Projektionsoperatoren der Wellenfkt. auf Eigenfkt führen beide zur "Kollaps" der Wellenfkt auf eine Eigenfkt. Der Eigenwert o der Eigenfunktionsgleichung $\hat{O}\Psi=o\Psi$ ist identisch mit dem Messwert. Zu jedem Messvorgang gibt es einen entsprechenden Operator.

Beispiel

Gegeben sei der Zustandsvector eines Systems mit zwei möglichen Zuständen $|\Psi\rangle = \alpha_1|\Phi_1\rangle + \alpha_2|\Phi_2\rangle$. Die Eigenfunktionen sind $|\Phi_1\rangle$ und $|\Phi_2\rangle$ und eine Messung wird mit Wahrscheinlichkeit α_1^2 das System in Zustand $|\Phi_1\rangle$ vorfinden.

In der QM wird diese Wahrscheinlichkeit ausgerechnet durch Anwendung des Operators A auf den Zustandsvektor. Z.B $A|\Phi_1\rangle = |\Phi_1\rangle$ und $A|\Phi_2\rangle = 0$ wenn A der Projektionsoperator auf den Zustand $|\Phi_1\rangle$ entspricht. Weiter gilt für die orthogonale Basis $\langle \Phi_1 | \Phi_1 \rangle = 1$ $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = 0$

In der Praxis entspricht die Anwendung eines Operators eine Messung, weil eine Messung auch den Zustandsvektor auf eine Eigenfunktion projiziert! Z.B Operator A entspricht bei der Katze eine Messung des Blutdruckes, womit bestätigt wird dass die Katze nicht bewusstlos ist. Beide, Messung und Operatoranwendung verursachen einen Kollaps der Wellen- oder Zustandfunktion auf einen Basisvektor (=Eigenzustand).

Damit gilt $\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \alpha_1 \langle \Phi_1 | A | \alpha_1 | \Phi_1 \rangle + \alpha_2 \langle \Phi_2 | A | \alpha_2 | \Phi_2 \rangle = \alpha_1^2$ d.h der "Überlapp" von $|\Psi\rangle$ und $\langle \Phi_1 |$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit.

Erwartungswerte

Allgemein: Erwartungswert $\langle O \rangle$ einer Variablen $O(x)$ ist $\int O(x)f(x)dx$,

wobei $f(x)$ die Wahrscheinlichkeit ist, dass $O(x)$ vorkommt.

In Bracket-Schreibweise: $\langle O \rangle = \int \Psi^* \hat{O}(x) \Psi(x)dx = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$,

wobei $\Psi(x)$ eine Eigenfunktion des Operators \hat{O} ist, d.h. $\hat{O}\Psi(x) = O\Psi$ ($O = \text{Messwert}$).

Beweis: $\langle O \rangle \{\text{Erwartungswert}\} = \int \Psi^* \hat{O} \Psi dx = \{\hat{O}\Psi = O\Psi\} = O \int \Psi^* \Psi dx = O \{\text{Messwert}\}$

Aufgabe: Finde für jeden möglichen Messwert den zugehörigen Operator \hat{O} .

Operatoren

klassisch	Operator
$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$E = \frac{p^2}{2m} + V$	$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ Laplace Operator $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
$L_x = yp_z - zp_y$	$\mathbf{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$
$L_y = zp_x - xp_z$	$\mathbf{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$L_z = xp_y - yp_x$	$\mathbf{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

Zusammenfassung

Messung ‚projiziert‘ ein Quantensystem aus einer Superposition in einen ‚Eigenzustand‘ des Messapparates:

$$|\Psi\rangle = \sum \alpha_i |\varphi_i\rangle$$

Kollaps der Wellenfunktion

Berühmtes Beispiel :

Schrödingers Katze:
ohne Messung Wellenfunktion ist Überlagerung
(oder „Superposition“) von

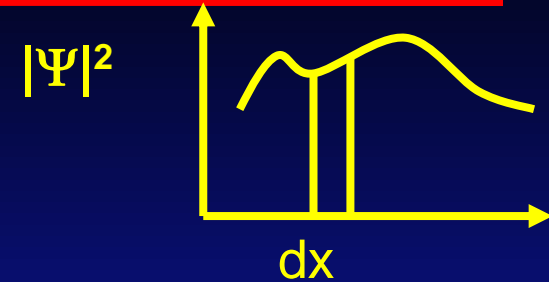
$|\text{bewusst}\rangle$ und $|\text{bewusstlos}\rangle$

Nach der Messung KENNE ich den Zustand und weiß, dass die Wellenfkt. nur noch eine Komponente hat, nämlich die Projektion nach Kollaps der Wellenfunktion. Der Erwartungswert vor der Messung wird gegeben durch:

$$\langle O \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$$

Frage: ist QM Mechanik eine komplette Theorie, d.h. kann man alle Komponenten der Wellenfkt. bestimmen?

$\int |\Psi|^2 dx$ ist Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Intervall dx zu finden. Wenn es dort gefunden wird, WO WAR DAS TEILCHEN VORHER?



3 Antworten:

1. **Realos (z.B. Einstein)**: Teilchen war irgendwo, z.B. in B; dann braucht die QM zusätzliche Angaben ("hidden" variables), die bestimmen, wie es von B nach A kommt.
2. **Fundis (Bohr etc.)**: Das Teilchen war überall und nirgends! Die Messung zwingt das Teilchen dazu, sich zu zeigen. (Wie Mister X im Spiel "Scotland Yard")
3. **Agnostiker (Pauli)**: Bitte keine Spekulationen, nur Wahrnehmungen zählen!!

bis 1964: 2) bevorzugt und 3) galt nur, wenn 1) und 2) nicht akzeptiert wurden.

ab 1964: John Bell entdeckt, dass man experimentell zwischen 1) und 2) unterscheiden kann, d.h. es macht einen Unterschied, ob das Teilchen zuvor eine wohldefinierte Position hatte.

Experimente zeigen, dass nur 2) richtig ist! QM ist eine komplette Theorie, die keine verborgene ("hidden") Parameter braucht.

Zum Mitnehmen

Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der QM wird gegeben durch das Quadrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl Ψ , die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt.

Z.B. für die Wahrscheinlichkeit P ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen gilt:

$$P=|\Psi(x,t)|^2$$

Ψ ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H \Psi(x,t)=E \Psi(x,t) \text{ oder zeitunabh. } H \Psi(x)=E \Psi(x)$$

H ist der Energieoperator und E ist die Energie

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{Laplace Operator}$$

Die beobachtbaren Zustände sind Eigenfunktionen der SG und die Messungen entsprechen der Eigenwertgleichung: $\hat{O}|\Psi\rangle = o|\Psi\rangle$
Hier ist \hat{O} ein Operator, der den “Kollaps” der Wellenfkt. auf eine Eigenfunktion herbeiführt; o ist der Messwert.

Die Schrödingergleichung kann Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchen als Fkt. von Ort und Zeit bestimmen. Bedeutung in QM daher wie $F=ma$ der KM.

Bedingungen einer Zustandsfunktion

Eine Zustandsfunktion muß, außer daß sie Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist, drei Kriterien erfüllen, damit sie physikalisch „sinnvoll“ sein kann:

1. Stetigkeit:

Es darf keine „Sprünge“ im Funktionsverlauf geben.

2. Eindeutigkeit:

Zu jeder Kombination von Variablenwerten gibt es genau einen Funktionswert.

3. Quadratische Integrierbarkeit und Normierbarkeit:

Die bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2) erhaltene Zustandsfunktion Ψ ist nicht notwendigerweise normiert, das heißt das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ ist nicht notwendigerweise a priori gleich eins. Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen 1 irgendwo im Raum, das Teilchen 2 ebenfalls irgendwo im Raum, ... und das Teilchen N irgendwo im Raum zu finden, gleich eins ist, muß dieses Integral aber immer gleich eins sein. Um dies zu erreichen, wird die Funktion Ψ mit der Normierungskonstanten c multipliziert, wobei c dadurch bestimmt wird, daß das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ (als „Summe“ der differentiell kleinen Einzelwahrscheinlichkeiten dW) gleich eins gesetzt wird:

$$\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1 \quad (2.9)$$

Daraus folgt der Ausdruck

$$c^* c = \frac{1}{\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N}, \quad (2.10)$$

der nur dann definiert ist, wenn das Integral im Nenner endlich ist; die Zustandsfunktion also, wie man sagt, quadratisch integrierbar ist. Die Funktion $c\Psi$ ist ebenfalls Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung:

Übersicht der Postulate der QM

Postulat 1 (Existenz einer Zustandsfunktion) Jeder Zustand eines Systems von N Teilchen mit der jeweiligen Masse m_i wird so vollständig wie möglich durch eine Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ beschrieben.

Jede experimentell meßbare Größe des Systems („Observable“) kann mittels der Zustandsfunktion Ψ berechnet werden.^a So ist beispielsweise der Ausdruck $\Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ proportional der Wahrscheinlichkeit dW zur Zeit t das Teilchen 1 an der Stelle \vec{r}_1 im Volumenelement dV_1 , das Teilchen 2 an der Stelle \vec{r}_2 im Volumenelement dV_2 , ... und das Teilchen N an der Stelle \vec{r}_N im Volumenelement dV_N zu finden.

Postulat 2 (Quantenmechanische Operatoren) Zu jeder Observablen O des Systems korrespondiert ein entsprechender quantenmechanischer Operator \bar{O} , deren elementaren Vertreter in der Tabelle : aufgelistet sind.

Postulat 3 (Scharfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die Eigenfunktion zum Operator \bar{O} sei, so daß gilt $\bar{O}\Psi = o\Psi$. Jede Messung der Observablen O an den einzelnen Systemen ergibt immer den gleichen Wert o ; jede sich wiederholende Messung an ein und demselben System ergibt ebenfalls immer den selben Wert o , sofern die Messung nicht den ursprünglichen Zustand Ψ des Systems verändert.

Postulat 4 (Unschärfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die nicht Eigenfunktion zum Operator \bar{O} sei. Messungen der Observablen O an den einzelnen Systemen führen nicht zum jeweils gleichen Wert, sondern zu einer Verteilung, deren Erwartungswert^b durch $\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ gegeben ist.

^aDie Variablen $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t$ der Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ werden häufig aus Platzgründen nicht explizit angegeben.

^bBei einer endlichen Zahl von Messungen wird der gefundene Mittelwert in der Regel vom berechneten Erwartungswert abweichen; erst bei einer unendlichen Zahl von Messungen geht der Mittelwert in den Erwartungswert über.

Übersicht der Postulate der QM

Postulat 5 (Schrödinger-Gleichung) Die Zustandsfunktion Ψ ist Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2).

$$\boxed{\overline{E}\Psi = \overline{H}\Psi = (\overline{E}_{kin} + \overline{V})\Psi} \quad (2.2)$$

Der Operator $\overline{H} = \overline{E}_{kin} + \overline{V}$ wird als HAMILTON-Operator bezeichnet, wobei \overline{E}_{kin} und \overline{V} für die Operatoren der kinetischen bzw. potentiellen Energie stehen. Diese Operatoren ergeben sich aus den klassischen Observablen gemäß Postulat 2 wie folgt:

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 \quad (2.3)$$

$$\Rightarrow \overline{E}_{kin} = \frac{1}{2m}\overline{\vec{p}}\overline{\vec{p}} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.4)$$

^cDas Integral $\int_{\mathbb{R}^3} \square dV$ bezeichnet die Integration über den gesamten Definitionsbereich des dreidimensionalen Raumes \mathbb{R}^3 und stellt damit eine Kurzschreibweise für das dreifache Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \square dx dy dz$ dar. Der Ausdruck dV bezeichnet hierbei das differentiell kleine Volumenelement $dV = dx dy dz$.

In der Literatur werden die Integrationsgrenzen bei der Integration über den gesamten dreidimensionalen Raum häufig weggelassen, so daß sich die Symbolik für diese Operation auf den Ausdruck $\int \square dV$ beschränkt.